

ANÁLISE DA AERODISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM LABORATÓRIOS DE PESQUISA COM BIOSSEGURANÇA

Bruno Perazzo Pedroso Barbosa

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientador: Nisio de Carvalho Lobo Brum

Rio de Janeiro
Agosto de 2017

ANÁLISE DA AERODISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM LABORATÓRIOS
DE PESQUISA COM BIOSSEGURANÇA

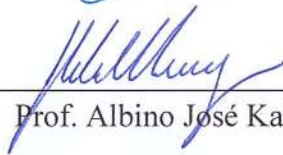
Bruno Perazzo Pedroso Barbosa

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:



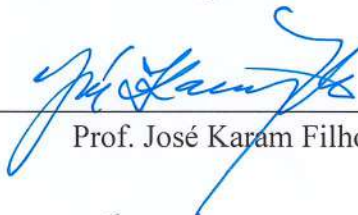
Prof. Nísio de Carvalho Lobo Brum, D.Sc.



Prof. Albino José Kalab Leiróz, Ph.D.



Prof. Hécio Rangel Barreto Orlande, Ph.D.



Prof. José Karam Filho, D.Sc.



Prof. José Roberto Simões Moreira, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

AGOSTO DE 2017

Barbosa, Bruno Perazzo Pedroso

Análise da Aerodispersão de Contaminantes em Laboratórios de Pesquisa com Biossegurança/ Bruno Perazzo Pedroso Barbosa. - Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2017.

XX, 219 p.: il.; 29,7cm

Orientador: Nisio de Carvalho Lobo Brum

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 171-180.

1. Contaminantes. 2. Laboratórios. 3. Biossegurança.
I. Brum, Nisio de Carvalho Lobo. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

Ao meu pai Leo, e ao pai dele, Lauro.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Nisio de Carvalho Lobo Brum, pela orientação desta tese, pelos conselhos, incentivo e apoio durante o processo. O professor Nisio é um Mestre cuja preocupação transcende a conclusão do trabalho de seus alunos; a sua conduta gera um “termo-fonte” que induz, àqueles que têm o privilégio de por ele serem orientados, à movimentação em direção ao progresso e ao crescimento, intelectual e pessoal. Sou muito grato por ter sido seu aluno desde a graduação, e devo a ele grande parte do meu desenvolvimento pessoal e profissional.

Aos professores do PEM- Programa de Engenharia Mecânica da COPPE, pelos ensinamentos das disciplinas cursadas ao longo da pós-graduação.

Ao LTTC-Laboratório de Transmissão e Tecnologia do Calor da COPPE, pela disponibilização de uma estação de trabalho e dos recursos computacionais necessários à realização das simulações numéricas deste trabalho.

Aos funcionários, colegas e amigos do LTTC, pela acolhida e suporte durante o período das simulações computacionais.

Aos meus colegas e amigos de trabalho da Fiocruz, pelo incentivo e apoio durante a realização deste trabalho.

À Fiocruz, pela liberação em tempo parcial, para que este trabalho pudesse ser concluído.

Finalmente, à minha família, minha esposa Dani e ao meu filho João Victor. O processo desta tese demandou-me a dedicar grande parte dos últimos 5 anos ao estudo e ao trabalho aplicado. Não teria conseguido atravessar os desafios associados se não contasse com a serenidade, incentivo e apoio de Dani em todos os momentos, e principalmente, nos difíceis. Sou grato ao meu filho por entender que este trabalho era importante para mim, e pelo apoio associado. Sou grato ao meu pai Leo, pelo apoio incondicional em todas as batalhas da Vida, e pelo incentivo na realização desta tese.

Resumo da Tese apresentada à COPPE / UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

ANÁLISE DA AERODISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM LABORATÓRIOS DE PESQUISA COM BIOSSEGURANÇA

Bruno Perazzo Pedroso Barbosa

Agosto / 2017

Orientador: Nisio de Carvalho Lobo Brum

Programa: Engenharia Mecânica

Este estudo se propôs a analisar o transporte de contaminantes aerodispersóides gerados em laboratórios de pesquisa com biossegurança. As análises foram realizadas utilizando-se simulações numéricas, pela técnica de dinâmica de fluidos computacional (CFD). Três benchmarks, relacionados a esta classe de problemas, foram utilizados para validação do código CFD utilizado. A modelagem do problema desta tese se baseia na premissa de que os contaminantes envolvidos foram gerados no interior de uma cabine de segurança biológica (BSC). Diversos cenários foram simulados, de modo a realizar testes de sensibilidade da capacidade de contenção de contaminantes da BSC às variações de condições de contorno selecionadas. Fatores representativos da capacidade de contenção e da eficácia de ventilação foram definidos e calculados para cada cenário, para embasar as análises comparativas e conclusões. Os resultados demonstraram que a contenção, para esta classe de problemas, é sensível à intensidade turbulenta do escoamento na sala e à velocidade de entrada de ar na BSC. A estratégia de se aumentar a taxa de ventilação pode reduzir esta capacidade de contenção. Uma simulação em regime transiente foi realizada, de modo a produzir informação sobre a ordem da escala de tempo do transporte do contaminante da BSC para a zona de ocupação da sala.

Abstract of Thesis presented to COPPE / UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

AIRBORNE CONTAMINANT DISPERSION ANALYSIS IN RESEARCH
LABORATORIES WITH BIOSAFETY LEVEL

Bruno Perazzo Pedroso Barbosa

August / 2017

Advisor: Nisio de Carvalho Lobo Brum

Department: Mechanical Engineering

This study was proposed to analyse the transport of airborne particle contaminants that are generated within research laboratories with biosafety level. The analysis were conducted using numerical simulations, with the computational fluid dynamics (CFD) technique. Three benchmarks, related to this class of problems, were used for CFD code validation. This thesis' modeling assumption was that related contaminants were generated inside a biological safety cabinet (BSC). Several scenarios were modeled, in order to promote sensitivity tests on the BSC's contaminant containment to variations on selected boundary condition values. Representative factors related to the containment capability and room ventilation effectiveness were defined and calculated for each scenario, in order to support the comparison analysis and conclusions. Results demonstrated that containment, for this class of problems, is affected by indoor flow turbulence intensity and by the BSC's inflow velocity. The strategy of increasing room ventilation rate may reduce this containment cabapility. A transient simulation was performed, in order to produce information on the order of the time scale related to the transport of the contaminant from the BSC to the room occupied zone.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	X
LISTA DE TABELAS.....	XIII
SIMBOLOGIA.....	XVI
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. <i>Contextualização e Motivação</i>	<i>1</i>
1.2. <i>Identificação do Problema e Estrutura de Análise</i>	<i>5</i>
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
2.1. <i>Infecções Aerotransportáveis</i>	<i>9</i>
2.2. <i>Histórico de Infecções Aerotransportáveis</i>	<i>11</i>
2.3. <i>Histórico de Infecções Associadas à Atividade Laboratorial</i>	<i>14</i>
2.4. <i>Controle de Infecções em Laboratórios</i>	<i>16</i>
2.5. <i>Estudos Preditivos de Aerodispersão de Contaminantes em Ambientes Internos</i> <i>21</i>	
3. ESCOAMENTO DO AR EM AMBIENTES INTERNOS	32
3.1. <i>Equações Governantes.....</i>	<i>32</i>
3.2. <i>Modelagem da Turbulência.....</i>	<i>35</i>
4. DINÂMICA DO TRANSPORTE DE AERODISPERSÓIDES EM AMBIENTES INTERNOS.....	54
4.1. <i>Caracterização dos Aerodispersóides</i>	<i>54</i>
4.2. <i>Dinâmica do Transporte de Aerodispersóides</i>	<i>57</i>
4.3. <i>Processos de Transporte de Aerodispersóides em um Ambiente Interno.....</i>	<i>61</i>
5. VALIDAÇÕES E SELEÇÃO DO CÓDIGO CFD	69
5.1. <i>Introdução</i>	<i>69</i>
5.2. <i>Identificação dos Casos de Validação.....</i>	<i>70</i>
5.3. <i>Identificação dos Códigos CFD.....</i>	<i>78</i>
5.4. <i>Metodologia de Avaliação</i>	<i>79</i>
5.5. <i>Metodologia de Simulação</i>	<i>81</i>
5.6. <i>Resultados e Análises das Simulações.....</i>	<i>96</i>
5.7. <i>Conclusões das Validações e Seleção do Código</i>	<i>121</i>

6.	ESPECIFICAÇÃO DO PROBLEMA E METODOLOGIA.....	124
6.1.	<i>Especificação do Problema.....</i>	<i>124</i>
6.2.	<i>Modelagem da Cabine de Segurança Biológica.....</i>	<i>127</i>
6.3.	<i>Modelagem do Contaminante.....</i>	<i>141</i>
6.4.	<i>Cálculo dos Fatores de Contenção.....</i>	<i>143</i>
6.5.	<i>Metodologia dos Testes de Sensibilidade de Contenção.....</i>	<i>146</i>
6.6.	<i>Análise da Escala de Tempo associada ao Vazamento de Contaminante do Interior da BSC À Zona de Respiração do Operador.....</i>	<i>149</i>
6.7.	<i>Metodologia das Simulações Numéricas.....</i>	<i>151</i>
7.	RESULTADOS E ANÁLISES.....	153
7.1.	<i>Testes de Refinamento de Malha.....</i>	<i>153</i>
7.2.	<i>Resultados do Teste de Sensibilidade da Intensidade Turbulenta de Downflow na Capacidade de Contenção.....</i>	<i>156</i>
7.3.	<i>Resultados do Teste de Sensibilidade da Carga Térmica do Laboratório na Capacidade de Contenção.....</i>	<i>157</i>
7.4.	<i>Resultados do Teste de Sensibilidade da Velocidade de Inflow na Capacidade de Contenção.....</i>	<i>157</i>
7.5.	<i>Resultados do Teste de Sensibilidade da Taxa de Renovação de Ar na Capacidade de Contenção.....</i>	<i>158</i>
7.6.	<i>Resultados da Análise da Escala de Tempo associada ao Vazamento de Contaminante do Interior da BSC à Zona de Respiração do Operador.....</i>	<i>160</i>
7.7.	<i>Análises dos Resultados.....</i>	<i>162</i>
8.	CONCLUSÕES.....	168
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	171
	ANEXO A.....	181
	ANEXO B.....	184
	ANEXO C.....	188
	ANEXO D.....	193
	ANEXO E.....	195
	ANEXO F.....	200
	ANEXO G.....	208
	ANEXO H.....	209

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 Modos de Ventilação. (a) MV – <i>mixed ventilation</i> . (b) DV – <i>displacement ventilation</i> . (c) UD – <i>Unidirectional ventilation</i>	49
Figura 5.1 Configuração geral do caso 3 do benchmark produzido pelo ASHRAE RP-1271. Fonte: Adaptado de ASHRAE (2009)	72
Figura 5.2 Configuração geral do caso 2 do benchmark de laboratório. Fonte: Adaptado de JIN et al (2012)	74
Figura 5.3 Configuração geral do caso 5Ha do benchmark hospitalar. Fonte: Adaptado de YIN et al (2009)	77
Figura 5.4 Planta-baixa do benchmark hospitalar, com a posição dos mastros de medições de velocidade, temperatura e contaminantes. Fonte: Adaptado de YIN et al (2009)	77
Figura 5.5 Disposição dos eixos de medição no domínio do benchmark da ASHRAE.	80
Figura 5.6 Configuração geral do modelo do benchmark de laboratório, utilizado no código CONTAM/CFD-0, com a malha gerada para uma seção transversal.....	88
Figura 5.7 Malha gerada para a mesma seção transversal do benchmark de laboratório, pelo software <i>meshing</i> da ANSYS, para uso com os códigos CFX e FLUENT	88
Figura 5.8 Pontos envolvidos no teste de convergência de malha para simulação do benchmark da ASHRAE.....	96
Figura 5.9 Perfis de velocidades em alguns eixos seleccionados, para a simulação do caso 2 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: x = (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: y = (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;	99
Figura 5.10 Perfis de velocidades em alguns eixos seleccionados, para a simulação do caso 3 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: x = (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: y = (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;	101

Figura 5.11 Perfis de energia cinética turbulenta (TKE) em alguns eixos selecionados, para a simulação do caso 3 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: x = (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: y = (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;	103
Figura 5.12 Posição dos elementos envolvidos no teste de convergência de malha, para o benchmark de laboratório	108
Figura 5.13 Posição dos elementos envolvidos no teste de convergência de malha, para o benchmark hospitalar.....	114
Figura 5.14 Resultados dos perfis de velocidade para alguns eixos selecionados da simulação do benchmark hospitalar. (a) P1, (b) P5, (c) P7, (d) P8	117
Figura 6.1 Configuração geral do laboratório modelado.....	125
Figura 6.2 Arranjo Geral da Sala 303, com o posicionamento da BSC	128
Figura 6.3 BSC instalada na Sala 303	128
Figura 6.4 Planos de medição da velocidade de descarga na BSC.....	130
Figura 6.5 Planos de medição da velocidade de <i>inflow</i> na BSC.....	132
Figura 6.6 Arranjo para medições da velocidade de inflow da BSC utilizando-se anemômetro de fio quente	132
Figura 6.7 Teste de Visualização do Escoamento da Cabine com Fumaça.	135
Figura 6.8 Pontos de medição da velocidade na área de trabalho da BSC.....	136
Figura 6.9 Medições das velocidades da área de trabalho da BSC utilizando-se anemômetro de fio quente	137
Figura 6.10 Padrão de escoamento no interior da BSC, conforme simulação numérica	140
Figura 6.11 Volume de Controle esquemático utilizado na definição dos fatores de contenção.....	143

Figura 6.12 Configuração do Laboratório e do Campo de Escoamento Associado, para a Simulação Transiente do Transporte de Contaminante	150
Figura 7.1 Campos de velocidade resultantes de diferentes taxas de renovação de ar no plano longitudinal de descarga da BSC ($z=0,4\text{m}$). (a) 17 ACH; (b) 15 ACH; (c) 9 ACH.	158
Figura 7.2 Campos de fração mássica resultantes de diferentes taxas de renovação de ar no plano transversal médio do laboratório ($x=3,3\text{m}$). (a) 17 ACH; (b) 15 ACH; (c) 9 ACH. Campos de eficácia de ventilação resultantes de diferentes taxas de renovação de ar, para o mesmo plano. (d) 17 ACH; (e) 15 ACH; (f) 9 ACH.	160
Figura 7.3 Resultados do teste transiente de concentração de contaminante.	161
Figura 7.4 Diferenças nas configurações dos fluxos operacionais das capelas de exaustão e das cabines de segurança biológica classe II-A2.	164

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 Constantes associadas ao modelo $\kappa\epsilon$ de turbulência.....	39
Tabela 3.2 Constantes associadas ao modelo RNG- $\kappa\epsilon$ de turbulência	42
Tabela 3.3 Constantes associadas ao modelo $\kappa\omega$ de turbulência	43
Tabela 3.4 Constantes associadas ao modelo SST $\kappa\omega$ de turbulência	44
Tabela 4.1 Estimativa da velocidade terminal de assentamento gravitacional de partículas stokesianas para as ordens de diâmetros de interesse no transporte de aerodispersóides	61
Tabela 5.1 Propriedades dos gases envolvidos nas simulações.....	83
Tabela 5.2 Resumo do cálculo estimativo da difusividade molecular dos gases envolvidos nas simulações.....	84
Tabela 5.3 Valor padrão do número de Schmidt turbulento de cada código utilizado...	85
Tabela 5.4 Características principais da modelagem matemática e numérica de cada código utilizado	95
Tabela 5.5 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS	97
Tabela 5.6 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam.....	98
Tabela 5.7 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades – Caso 2 do benchmark da ASHRAE.....	100
Tabela 5.8 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades – Caso 3 do benchmark da ASHRAE.....	102
Tabela 5.9 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de TKE – Caso 3 do benchmark da ASHRAE.....	104

Tabela 5.10 Resultados de simulações de viscosidade turbulenta [Pa.s]– Caso 3 do benchmark da ASHRAE.....	105
Tabela 5.11 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS-benchmark laboratório	109
Tabela 5.12 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam- benchmark laboratório	110
Tabela 5.13 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX RNG ke- benchmark laboratório.....	111
Tabela 5.14 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX SST kw- benchmark laboratório.....	111
Tabela 5.15 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código FLUENT- benchmark laboratório.....	111
Tabela 5.16 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CONTAM/CFD-0- benchmark laboratório	112
Tabela 5.17 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS-benchmark hospitalar	115
Tabela 5.18 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam- benchmark hospitalar.....	116
Tabela 5.19 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades – Caso 3 do benchmark da ASHRAE.....	118
Tabela 5.20 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX-SST kw- benchmark hospitalar	118
Tabela 5.21 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX-RNG ke- benchmark hospitalar.....	119
Tabela 5.22 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código FLUENT- benchmark hospitalar.....	119

Tabela 5.23 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CONTAM/CFD-0- benchmark hospitalar	119
Tabela 6.1 Dados operacionais do laboratório base modelado para as simulações	127
Tabela 6.2 Dados Técnicos da Cabine de Segurança Biológica Utilizada nas Medições Experimentais	129
Tabela 6.3 Resultados das Medições das Velocidades Médias de Exaustão da BSC ..	131
Tabela 6.4 Resultados das Medições da Velocidade de <i>Inflow</i> a Partir da Vazão de Exaustão da BSC	131
Tabela 6.5 Resultados das Medições da Velocidade Média de <i>Inflow</i> da BSC	133
Tabela 6.6 Condições Operacionais da Cabine de Segurança Biológica	137
Tabela 6.7 Teste de Independência de Malha da Modelagem da Cabine de Segurança Biológica.....	138
Tabela 6.8 Resultados da Validação da Modelagem Numérica da Cabine de Segurança Biológica.....	139
Tabela 6.9 Dados Gerais dos Casos sobre o Mesmo Laboratório, mas com diferentes Taxas de Renovação de Ar	149
Tabela 6.10 Características principais da modelagem matemática e numérica	151
Tabela 7.1 Resultados da avaliação da qualidade das malhas adotadas.....	153
Tabela 7.2 Resultados do teste de refinamento de malha e avaliação do erro numérico associado – GCI method-parte 1	155
Tabela 7.3 Resultados do teste de refinamento de malha e avaliação do erro numérico associado – GCI method-parte 2	156

SIMBOLOGIA

$A \rightarrow$ Área [m^2];

ACH \rightarrow *Air changes per hour*; Trocas horárias do ar;

Ar \rightarrow Número de Arquimedes;

$B \rightarrow$ constante aditiva adimensional $\approx 5,5$ (paredes lisas);

BLF \rightarrow *Box leakage factor*, Fator de dispersão para a sala;

BSC \rightarrow *Biological safety sabinet*, Cabine de segurança biológica;

BSL \rightarrow *Biosafety level*, Nível de biossegurança;

$C \rightarrow$ Concentração [$ppm, kg \cdot kg^{-1} ar$];

$C_{max} \rightarrow$ Máxima concentração do contaminante considerado [$ppm, kg \cdot kg^{-1} ar$];

$\bar{C}_p \rightarrow$ Concentração média do contaminante em um eixo [$ppm, kg \cdot kg^{-1} ar$];

$\bar{C}_{p,h} \rightarrow$ Concentração média do contaminante na altura de respiração [$ppm, kg \cdot kg^{-1} ar$];

$c \rightarrow$ calor específico [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$];

$c_p \rightarrow$ Calor específico a pressão constante [$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$];

$C_{d,p} \rightarrow$ Coeficiente de arraste de uma partículas aerodispersóide;

C.A.V. \rightarrow *Constant air volume*, Vazão de ar constante;

CEQ \rightarrow Capela de exaustão química;

$d \rightarrow$ Diâmetro equivalente [m];

$d_p \rightarrow$ Diâmetro de uma partículas aerodispersóide [m];

$D_b \rightarrow$ Difusividade de partículas aerodispersóides pelo movimento browniano [$m^2 \cdot s^{-1}$];

$D_t \rightarrow$ Difusividade de partículas aerodispersóides pelo transporte turbulento [$m^2 \cdot s^{-1}$];

$\dot{D}_c \rightarrow$ Vazão mássica de contaminante transportada por difusão e turbulência [$kg.s^{-1}$];

DV \rightarrow *Displacement ventilation*, modo de ventilação por deslocamento positivo;

$e \rightarrow$ energia interna térmica [$J.kg^{-1}$];

EPC \rightarrow Equipamento de proteção coletiva

EPI \rightarrow Equipamento de proteção individual

$\dot{F}_c \rightarrow$ Vazão mássica de contaminante transportada por advecção [$kg.s^{-1}$];

$g \rightarrow$ aceleração da gravidade [$m.s^{-2}$];

$G_K \rightarrow$ Produção de energia turbulenta pela ação do empuxo térmico [$W.m^{-3}$];

Gr \rightarrow Número de Grashof;

$h \rightarrow$ Coeficiente de transferência de calor por convecção [$W.m^{-2}.K^{-1}$];

IEQ \rightarrow *Indoor environmental quality*, qualidade do ambiente interior;

$J_c \rightarrow$ Fluxo difusivo equivalente de contaminantes [$kg.s^{-1}.m^{-2}$];

$k \rightarrow$ Condutividade térmica [$W.m^{-1}.K^{-1}$];

$K_T \rightarrow$ Energia cinética turbulenta, por unidade de massa [$J.kg^{-1}$];

$l \rightarrow$ Dimensão, dimensão característica [m];

$l_o \rightarrow$ Dimensão característica do dispositivo de insuflação de ar [m];

$m \rightarrow$ Massa [kg];

$\dot{m} \rightarrow$ Vazão mássica [$kg.s^{-1}$];

$m_p \rightarrow$ Massa de uma partículas aerodispersóide [kg];

MV \rightarrow *Mixed ventilation*, modo de ventilação por mistura;

$n \rightarrow$ concentração numérica de partículas aerodispersóides [$partículas.m^{-3}$];

$Nu \rightarrow$ Número de Nusselt;

$P \rightarrow$ Pressão termodinâmica [Pa];

$P' \rightarrow$ Flutuação instantânea da pressão termodinâmica [Pa];

$Pe \rightarrow$ Número de Péclet;

$PF \rightarrow$ *Protection factor*, fator de proteção da cabine;

$Pr \rightarrow$ Número de Prandtl;

$Pr_t \rightarrow$ Número de Prandtl turbulento;

$P_K \rightarrow$ Produção de energia turbulenta pela ação dos gradientes de velocidade [$W.m^{-3}$];

$Re \rightarrow$ Número de Reynolds;

R.M.S. \rightarrow *Root mean square*, raiz quadrática media;

$S_p \rightarrow$ Distância de parada de uma partículas aerodispersóide [m];

$Sch \rightarrow$ Número de Schmidt;

$Sch_t \rightarrow$ Número de Schmidt turbulento;

$SLF \rightarrow$ *Sash leakage factor*, fator de vazamento da cabine;

$Stk \rightarrow$ Número de Stokes;

$\dot{Q} \rightarrow$ Fluxo de calor [W];

$QAI \rightarrow$ Qualidade do ar interior;

$S_{M,\rho} \rightarrow$ Fonte de quantidade de movimento do fluido, por unidade de massa [$m.s^{-2}$];

$S_{ij} \rightarrow$ Tensor taxa de deformação desviatória [s^{-1}];

$T \rightarrow$ Temperatura termodinâmica [K];

$T' \rightarrow$ Flutuação instantânea da temperatura termodinâmica [K];

$T_o \rightarrow$ Temperatura termodinâmica de referência, para uso na hipótese de Boussinesq [K];

$TI \rightarrow$ *Turbulence intensity*, intensidade de turbulência;

$TKE \rightarrow$ *Turbulent kinetic energy*, energia cinética turbulenta;

$\mathbf{u} \rightarrow$ Velocidade instantânea do fluido [$m.s^{-1}$];

$\mathbf{U} \rightarrow$ Velocidade média do fluido, ponderada sobre o tempo [$m.s^{-1}$];

$\mathbf{u}' \rightarrow$ Flutuação instantânea da velocidade do fluido [$m.s^{-1}$];

$\mathbf{u}_p \rightarrow$ Velocidade de uma partícula aerodispersóide [$m.s^{-1}$]

$u_{p,t} \rightarrow$ Velocidade terminal de uma partícula aerodispersóide [$m.s^{-1}$]

$u_\tau \rightarrow$ Velocidade de fricção [$m.s^{-1}$]

UFAD \rightarrow *Underfloor air distribution*, modo de ventilação com distribuição pelo piso;

UR \rightarrow Umidade relativa;

$t \rightarrow$ tempo [s, h];

$\dot{V} \rightarrow$ Vazão [L/s];

V.A.V. \rightarrow *Variable air volume*, Vazão de ar variável;

Símbolos Gregos:

$\alpha \rightarrow$ difusividade térmica [$m^2.s^{-1}$];

$\beta \rightarrow$ coeficiente de expansão térmica [K^{-1}];

$\delta \rightarrow$ Espessura da camada limite do escoamento paralelo à uma placa plana [m];

$\delta_{ij} \rightarrow$ Delta de Kronecker ($= 1$, quando $i = j$; $= 0$, quando $i \neq j$);

$\varepsilon_T \rightarrow$ Taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, por unidade de massa [$W.kg^{-1}$];

$\Phi_v \rightarrow$ Termo de dissipação viscosa de energia interna térmica [$W.m^{-3}$];

$\kappa \rightarrow$ Constante de Von Karman, adimensional $\approx 0,4$;

$\mu \rightarrow$ Viscosidade dinâmica (molecular) [$kg.m^{-1}.s^{-1}$];

$\mu_T \rightarrow$ Viscosidade dinâmica (turbulenta) [$kg.m^{-1}.s^{-1}$];

$\mu_{eff} \rightarrow$ Viscosidade dinâmica (efetiva) = $\mu + \mu_T$ [$kg.m^{-1}.s^{-1}$];

$\nu \rightarrow$ Viscosidade cinemática (molecular) [$m^{-2}.s^{-1}$];

$\nu_T \rightarrow$ Viscosidade cinemática (turbulenta) [$m^{-2}.s^{-1}$];

$\nu_{eff} \rightarrow$ Viscosidade cinemática (efetiva) = $\nu + \nu_T$ [$m^{-2}.s^{-1}$];

$\xi \rightarrow$ Eficácia de ventilação;

$\bar{\xi}_p \rightarrow$ Eficácia de ventilação média em um eixo;

$\bar{\xi}_{p,h} \rightarrow$ Eficácia de ventilação na altura de respiração;

$\rho \rightarrow$ Massa específica [$kg.m^{-3}$];

$\rho_o \rightarrow$ Massa específica de referência, para uso na hipótese de Boussinesq [$kg.m^{-3}$];

$\rho_p \rightarrow$ Massa específica de uma partículas aerodispersóide [$kg.m^{-3}$];

$\tau_p \rightarrow$ Tempo de relaxação de uma partículas aerodispersóide [s];

$\tau_w \rightarrow$ Tensão cisalhante na parede, oriunda do escoamento do fluido [$N.m^{-2}$];

$\chi \rightarrow$ Fração mássica;

$\bar{\chi}_c \rightarrow$ Fração mássica média de contaminante;

1. INTRODUÇÃO

1.1. CONTEXTUALIZAÇÃO E MOTIVAÇÃO

Laboratórios de pesquisa com biossegurança são ambientes com a finalidade de manipulação controlada e contida de agentes infecciosos. Estes incluem todos os organismos patogênicos, como bactérias, vírus, fungos e demais parasitas, que podem causar uma infecção nos pesquisadores pela exposição às amostras manipuladas no laboratório. O grau de contenção exigido depende de uma série de fatores, envolvendo a classe de risco de agente, a quantidade envolvida, os tipos de procedimentos que serão executados e a viabilidade do agente no meio. Os graus de contenção são traduzidos em níveis de biossegurança (BSL, *biosafety level*), que variam de 1 a 4 (BSL-1 a BSL-4), aumentando em função de risco e complexidade. Cada nível de biossegurança estabelece um conjunto de procedimentos, equipamentos de proteção individual (EPIs) e coletiva (EPCs), e de controles de engenharia. Os EPCs são formados por cabines de segurança biológica (BSCs, *biological safety cabinets*) e capelas de exaustão química. A correta aplicação dos procedimentos e de EPIs e EPCs formam as principais barreiras de contenção, sendo usualmente denominadas como barreiras primárias. Os protocolos e especificações associados a cada nível são definidos pelos programas de controle de infecção da Organização Mundial da Saúde (WHO, *world health organization*), e do CDC (*Centers for Disease Control*).

Apesar de todo avanço tecnológico e da aplicação destes programas de controle de infecção, estudos epidemiológicos recentes demonstram que um número considerável de infecções oriundas da atividade laboratorial ainda é reportado entre os trabalhadores destes ambientes (SEWELL, 2006, KUPSKAY, 2002). Dados históricos

identificaram claramente que uma das rotas de infecção é a inalação de aerossol formado a partir de procedimentos realizados em amostras contendo os agentes patogênicos (SEWELL, 2006). A Organização Mundial da Saúde considera que a geração interna de bioaerossol representa uma importante fonte de infecção em laboratórios (WHO, 2004). Este pode ser gerado a partir das atividades cotidianas de moagem, trituração, agitação, sonicação e centrifugação de materiais infecciosos (WHO, 2004). A complexidade deste controle aumenta em função de que há casos de infecção oportunística por aerossol, isto é, infecções que são geralmente reconhecidas por se estabelecerem por outras rotas, mas que, em algumas condições, podem usar partículas finas aerossolizadas como eficiente meio de propagação. (ROY et MILTON, 2004; SEWELL, 2006). O risco também aumenta na medida que a globalização acelera a dispersão de agentes infecciosos pelo mundo, mudanças climáticas expandem as faixas endêmicas de alguns agentes patogênicos e de seus vetores, novos agentes são identificados, a resistência dos agentes às drogas de tratamento aumenta, e novas tecnologias e testes são introduzidos no laboratório. Estes eventos aumentam o risco potencial de exposição dos pesquisadores a agentes infecciosos que não são frequentemente manipulados (SEWELL, 2006). ROY *et* MILTON (2004) consideram que o recente caso chinês de transmissão aérea do vírus da SARS (*severe acute respiratory syndrome*) pode ser o prenúncio de um novo padrão não-ortodoxo de transmissão de agentes infecciosos no ambiente construído moderno.

O sistema de ventilação mecânica e de condicionamento de ar (HVAC, *heating, ventilation and air conditioning*) destes ambientes regula diversos mecanismos que influenciam diretamente na concentração de bioaerossol em suspensão no ar dos laboratórios. A admissão de ar exterior promove a diluição dos contaminantes em suspensão (YUGUO *et al*, 2015). A filtragem da parcela de ar recirculada reduz a concentração de contaminantes através de vários mecanismos de captura, em função do tamanho de partícula envolvido (NAZAROFF, 2004). O tipo de distribuição de ar na sala influencia a taxa de deposição de partículas nas superfícies (ZHAO *et* WU, 2007). A pressurização relativa entre ambientes minimiza a migração de partículas de áreas contidas para áreas não controladas (YUGUO *et al*, 2015). Estudos demonstram que o controle da umidade relativa dos ambientes pode auxiliar na contenção de infecções de Influenza A (YANG *et* MARR, 2011). Já foi demonstrado que o sistema de HVAC

influencia consideravelmente o padrão de escoamento do ar nos edifícios, e que pode ser associado com a transmissão de diversas doenças infecciosas, como sarampo, tuberculose, catapora, influenza, varíola e SARS (LI *et al*, 2007).

A especificação do sistema de HVAC destes ambientes é determinada pelos critérios construtivos de cada nível de biossegurança, apresentando complexidade superior a sistemas de edificações comerciais e residenciais. No caso dos sistemas para laboratórios, DELUGA (1997) considera que seu primeiro objetivo é a manutenção da saúde e da segurança dos ocupantes, ficando o alcance das condições ambientais de temperatura e umidade como um objetivo secundário. As bases de projeto são definidas pelo conjunto de recomendações contidas nas normas e recomendações técnicas do CDC (2007), NIH (*National Institutes of Health*, 2016), ANSI/AIHA/ASSE (*American National Standards Institute / American Industrial Hygiene Association / American Society of Safety Engineers*, 2012), ASHRAE (*American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers*, 2003), ASHRAE/ANSI/ASHE (*American Society of Health Care Engineers*, 2013) e OSHA (*Occupational Safety and Health Administration*, 2012), no âmbito dos EUA, e pelas normas do Ministério da Saúde (2000, 2010), ANVISA (Agência Nacional de Vigilância Sanitária, 2002, 2003) e ABNT (Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2005), para o Brasil.

A aplicação dos requisitos destas normas e recomendações técnicas promove a especificação de sistemas com considerável complexidade e de intenso consumo energético. De acordo com a ASHRAE (2003), não são raros os sistemas Laboratoriais que operam sob regime de 100% de ar exterior. As vazões mínimas de ar estão na faixa entre 6 e 10 ACH (*air changes per hour*, trocas de ar por hora, ASHRAE, 2003). DELUGA (1997) sugere valores entre 10 e 12 ACH. O NIH (2010) estabelece uma taxa mínima de 6 ACH para seus laboratórios. A especificação da classe de filtragem do ar de insuflação depende dos requisitos do laboratório. A ASHRAE (2003) recomenda a aplicação de filtragem classe F7 a F9, de acordo com a classificação da norma EN-779 (2002), para laboratórios com nível de biossegurança. O NIH (2016) recomenda a aplicação de filtragem classe F9. A aplicação de filtros com alta eficiência, e alta perda de carga, demanda alta potência para movimentação de ar. WEALE *et al* (2005) apontam o sistema de movimentação de ar de laboratórios como um dos grandes

consumidores de eletricidade deste tipo de edificação. Estudos do *LAWRENCE BERKELEY NATIONAL LABORATORY* (2011) reportam que o uso de energia e água em um laboratório típico é cinco vezes maior do que em escritórios. WIRDZEK *et al* (2003) estimam que este valor esteja entre 5 a 10. Aproximadamente 50% deste consumo está relacionado ao sistema de ventilação, entre movimentação e pré-condicionamento do ar exterior (BELL, 2008). Estes dados reforçam que o dimensionamento da taxa de ventilação é um parâmetro crítico para o consumo de energia da edificação de laboratórios. BELL (2008) menciona que a prática usual de projeto está em se adotar as maiores taxas de ventilação propostas pelas normas. Esse autor considera que esta prática, para o controle de diluição de contaminantes, deve ser visualizada com cautela, porque esta escolha não estará, necessariamente, associada a um ambiente mais seguro (BELL, 2008).

Estudos recentes demonstraram que a estratégica de se aumentar a taxa de ventilação, em sistemas de ventilação por mistura, tem eficácia limitada no controle de infecção por aerodispersóides (MEMARZADEH, 2009; PANTELIC *et* THAM, 2012; MEMARZADEH *et* XU, 2012; FAULKNER *et al*, 2013; CHEN *et al*, 2014), e que os padrões locais de escoamento são mais importantes do que uma taxa de ventilação global, para este controle (MEMARZADEH, 2009; BOLASHIKOV *et al*, 2012; GROSSKOPF *et* HERSTEIN, 2012; MEMARZADEH *et* XU, 2012; PANTELIC *et* THAM, 2013). A ACGIH (*American Conference of Governmental Industrial Hygienists*) desaconselha o dimensionamento do sistema de ventilação a partir de uma base de “trocas horárias do ar da sala” (ACGIH, 2013), por considerar que esta base não garante necessariamente a segurança ocupacional em um ambiente no qual haja fontes de poluentes. A norma *Laboratory Ventilation* da ANSI / AIHA / ASSE (2012) também não especifica nenhuma taxa de ventilação mínima para laboratórios, pelos mesmos motivos. A nova versão da norma 1910.1450 da OSHA (2012) também aboliu a sugestão de qualquer taxa de ventilação para laboratórios. Estas organizações e normas estabelecem a necessidade da elaboração de uma Análise de Riscos Ocupacionais, de caráter multidisciplinar, para elaboração das bases de projeto dos sistemas de ventilação do Laboratório.

YUGUO *et al* (2015) consideram que significantes questões ainda perduram sobre os requisitos da ventilação de ambientes internos com objetivo de controle de infecção aerotransportável. A ASHRAE (2014) considera que há elevada prioridade na pesquisa da interconexão entre os sistemas de ventilação e a dispersão de bioaerossol infeccioso em laboratórios com biossegurança. A ASHRAE (2014) considera ainda que esta prioridade deve ser focada no estudo dos regimes de escoamento interno aos ambientes. Este estudo deve ser conduzido de modo a quantificar a variação da propagação de doenças com a variação da taxa de ventilação (ASHRAE, 2014).

1.2. IDENTIFICAÇÃO DO PROBLEMA E ESTRUTURA DE ANÁLISE

Motivado pela contextualização precedente, este trabalho foi então conduzido, alinhado com prioridade de pesquisa proposta pela ASHRAE (2014), para a análise do transporte de aerodispersóides gerados no interior de laboratórios com nível de biossegurança. Laboratórios com nível 2 e 3 de biossegurança (BSL-2 e BSL-3) são o objeto desta pesquisa, visto que são os tipos mais comuns de laboratórios de microbiologia (DE LUGA, 1997). Os laboratórios BSL-4 estão fora desta análise, dado que se caracterizam como um tipo muito específico, que demanda instalação altamente sofisticada, sendo, portanto, pouco comum (DI BERARDINIS *et al*, 2013) e restrito a poucos países no mundo. As características gerais destes laboratórios estão descritas no próximo capítulo.

Como premissa básica deste estudo, considerou-se que os contaminantes envolvidos foram gerados no interior de uma cabine de segurança biológica (BSC), visto que o uso deste equipamento é determinado, pelos protocolos nacionais (Ministério da Saúde, 2000) e internacionais (WHO, 2004; CDC, 2007), para a condução de procedimentos com potencial de aerossolização.

O objetivo principal deste trabalho foi analisar a sensibilidade da capacidade de contenção de contaminantes aerodispersóides a diferentes padrões de escoamento do ar, resultantes de variações nas condições de contorno impostas. A capacidade de contenção destes contaminantes foi quantificada, principalmente, por meio do fator de vazamento da cabine (SLF, *sash leakage factor*), adotando metodologia semelhante à de MEMARZADEH (1996). Este fator é calculado pela razão entre a vazão de

contaminantes que escapa da cabine e a taxa de geração de contaminantes. Outros fatores, como a eficácia de ventilação da sala (ξ , *ventilation effectiveness*), o fator de proteção (PF, *protection factor*) e o fator de dispersão para a sala também foram adotados nas análises complementares. A eficácia de ventilação é um parâmetro que é usualmente adotado em estudos de ventilação para controle de infecção (JIN et al, 2012; MEMARZADEH et XU, 2012; CHEN et al, 2014), sendo a razão entre a concentração de contaminante na exaustão da sala e no ponto de interesse. Salas com sistemas de alta eficácia de ventilação produzem menor concentração de contaminantes na zona respirável. Esta eficácia, entretanto, é altamente dependente do padrão de escoamento na sala (MEMARZADEH et XU, 2012). O fator de proteção é usualmente adotado para analisar a eficácia de equipamentos de exaustão local (OLANDER et al, 2001), sendo a razão entre a concentração de contaminante na exaustão do equipamento e na zona de respiração do operador. O o fator de dispersão para a sala foi definido de modo semelhante ao fator de vazamento da caixa (BLF, *box leakage factor*), utilizado por MEMARZADEH (1996). Este fator quantifica o percentual de vazamento da BSC que é efetivamente transportado para a sala, dado que um percentual do vazamento difusivo é removido pela advecção imposta pelo fluxo de *inflow*. A descrição detalhada destes fatores, bem como a metodologia de cálculo, será apresentada em capítulos seguintes.

Diversos cenários, com diferentes condições de contorno, foram especificados, para a realização dos testes de sensibilidade de contenção. A simulação numérica, através de dinâmica de fluidos computacional (CFD, *computational fluid dynamics*) foi utilizada para quantificar o desempenho de contenção de cada cenário. Os resultados foram utilizados para a realização de análises comparativas. Basicamente, foram especificados cenários que promovessem testes de sensibilidade da capacidade de contenção às variações dos valores das seguintes condições de contorno:

- Intensidade de turbulência da entrada de ar do escoamento unidirecional interno à BSC (*downflow*): O estudo de MEMARZADEH (1996), sobre a capacidade de contenção de capelas de exaustão, verificou que a contenção da capela é influenciada pela intensidade turbulenta da sala. Este teste teve por objetivo verificar esta relação para o caso da BSC, e também verificar se a intensidade turbulenta do fluxo de *downflow* representa, isoladamente, um fator majoritário

nesta influência. Em caso positivo, os fabricantes destes equipamentos devem conduzir melhorias de modo a minimizar a intensidade turbulenta neste fluxo.

- Carga térmica do ambiente: Este teste teve por objetivo verificar se a modificação dos padrões de escoamento na sala, pela presença de plumas térmicas oriundas da dissipação térmica dos equipamentos laboratoriais, influencia na capacidade de contenção da BSC.
- Vazão de descarga da BSC (que governa a velocidade média de entrada de ar pela abertura da BSC (velocidade de *inflow*): A norma de certificação das BSCs (NSF / ANSI, 2009) estabelece que a velocidade média de entrada de ar pela abertura de trabalho da BSC (velocidade de *inflow*) deve estar na faixa entre 0,51 a 0,56 $m.s^{-1}$. OLANDER *et al* (2001) mencionam que uma redução da velocidade de *inflow* estará relacionada com uma redução da capacidade de contenção. Este teste foi conduzido para verificar se a modelagem numérica de contenção é consistente, e para produzir uma estimativa desta redução de capacidade. Como esta velocidade é governada pela vazão de descarga da cabine, sua redução pode vir a ocorrer, em laboratórios reais, com a saturação do filtro de descarga da cabine. Este cenário acabará ocorrendo, caso o filtro não seja substituído em tempo hábil.
- Vazão de ventilação do laboratório (que governa a taxa de ventilação): Este teste foi conduzido para analisar a sensibilidade da capacidade de contenção à variação da taxa de ventilação do laboratório. Em cenários idealizados, nos quais uma sala é ventilada com mistura perfeita (sem gradientes de concentração de contaminantes), o aumento da taxa de ventilação reduz a concentração, para uma fonte fixa de contaminantes. Apesar deste benefício, o uso de valores elevados desta taxa prejudica o desempenho energético, e já demonstrou ter eficácia limitada no controle de infecções (MEMARZADEH, 2009; PANTELIC *et* THAM, 2012; MEMARZADEH *et* XU, 2012; FAULKNER *et al*, 2013; CHEN *et al*, 2014). A pesquisa de BELL (2008) apresenta dados de desempenho de laboratórios reais, nos quais o uso de valores excessivos de taxa de ventilação acabou por reduzir as condições de segurança de laboratórios nos quais contaminantes perigosos eram manipulados. Este teste procura estender esta análise ao caso particular dos laboratórios com nível de biossegurança, e está

diretamente enquadrado na prioridade de pesquisa estipulada pela ASHRAE (2014).

Estes testes foram conceitualizados de modo a se verificar os limites racionais das estratégias de ventilação no controle e contenção destes contaminantes, de modo a produzir informação técnica que contribua para a compreensão do papel do sistema no controle de infecções e na saúde dos pesquisadores.

O capítulo 2 contempla uma revisão bibliográfica de trabalhos similares, histórico e controle de infecções aerotransportáveis.

O capítulo 3 apresenta uma revisão bibliográfica da teoria relacionada ao escoamento do ar em um ambiente interno.

O capítulo 4 apresenta uma revisão bibliográfica da teoria relacionada à dinâmica de aerodispersóides e ao transporte de contaminantes em um ambiente interno.

O capítulo 5 apresenta as validações de três códigos CFD candidatos e a seleção do código utilizado. Os códigos foram validados através de três estudos experimentais (*benchmarks*), relacionados à classe de problemas do escoamento do ar em ambientes internos e transporte de contaminantes em laboratórios e hospitais.

O capítulo 6 apresenta a especificação completa do problema estudado, da metodologia adotada, e do cálculo dos fatores envolvidos.

O capítulo 7 apresenta os resultados das simulações envolvidas, e a discussão dos resultados.

O capítulo 8 apresenta as conclusões desta pesquisa e a proposta de trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. INFECCÕES AEROTRANSPORTÁVEIS

A infecção causada pela inalação de microorganismos patogênicos carregados por partículas aerossolizadas é denominada de infecção aerotransportável (GROSSKOPF *et al.* HERSTEIN, 2012). A infecção pode vir a ocorrer, caso um indivíduo suscetível inale as partículas contendo agentes patogênicos, e estas sejam depositadas em uma localização adequada no trato respiratório (MEMARZADEH, 2013). Os aerossóis infecciosos de maior preocupação constituem aqueles cujas partículas apresentam tamanho respirável, e que possuam capacidade de permanecer viáveis por longos períodos de tempo (GROSSKOPF *et al.* HERSTEIN, 2012). As partículas que apresentam maior risco de penetração no trato respiratório inferior (alvéolos) apresentam diâmetro aerodinâmico da ordem de grandeza de $1\mu\text{m}$ (ASHRAE, 2013a).

Os aerossóis infecciosos podem ser gerados por fontes humanas ou ambientais. Quando uma pessoa infectada espirra, tosse, fala, ou mesmo respira, gotículas carregando germes são liberadas (NICAS *et al.*, 2005; YANG *et al.* MARR, 2011; YUGUO *et al.*, 2015). No caso da atividade laboratorial, estas gotículas podem ser geradas nos testes e procedimentos cotidianos envolvendo amostras líquidas (SEWELL, 2006; KUPSKAY, 2002; DI BERARDINIS *et al.*, 2013). A distribuição de tamanho inicial das gotículas depende basicamente do processo que as produziu (MORAWSKA, 2006). FRIEDLANDER (2000) considera que, para gotículas líquidas, o diâmetro (d_p) é a medida inequívoca adotada para caracterização do tamanho de partícula. DI BERARDINIS *et al.* (2013), consideram que equipamentos laboratoriais como

centrífugas, sonificadores e agitadores podem gerar uma grande quantidade de partículas respiráveis.

Seguindo-se à sua liberação no ar ambiente, as gotículas sofrem um processo de evaporação, que promove a redução de seu diâmetro (MORAWSKA, 2006; YANG *et al*, 2011). A presença de solutos não-voláteis, como Sódio, Potássio e glicoproteínas, evita a completa evaporação a um núcleo infeccioso sólido, limitando esta redução à metade de seu diâmetro inicial (YANG *et al*, 2011; GROSSKOPF *et al*, 2012). Este processo ocorre em questão de milissegundos, para gotículas com diâmetro inicial da ordem de 1 μm (MORAWSKA, 2006), e em menos de 0,5 s para gotículas com diâmetro inicial da ordem de 10 μm (YANG *et al*, 2011). As gotículas também estarão sujeitas a diversos mecanismos de transporte, como difusão molecular e turbulenta, e ação gravitacional e inercial, dentre outros (MORAWSKA, 2006). A dinâmica das gotículas maiores é significativamente governada pela ação gravitacional, o que promove a sua rápida deposição, em distâncias da ordem de 1 m da fonte (XIE *et al*, 2007; ASHRAE, 2014). Para esta classe de contaminantes, não há possibilidade de controle pelas técnicas de ventilação diluidora, exaustão local e pressurização diferencial (ASHRAE, 2014). As gotículas menores, com diâmetro inicial $d_p < O(100\mu\text{m})$, evaporam rapidamente, na interação com o ar ambiente, alcançando diâmetros que as habilitam a permanecer em suspensão durante longo período de tempo (NICAS *et al*, 2005; MORAWSKA, 2006; XIE *et al*, 2007; GROSSKOPF *et al*, 2012). O termo “núcleo residual de gotículas” (*droplet nuclei*) é geralmente empregado para descrever estas partículas resultantes da evaporação das gotículas, e que podem permanecer em suspensão por longos períodos de tempo (ASHRAE, 2014). Este núcleo residual de gotículas pode conter microorganismos potencialmente viáveis, que contam com a proteção de um envelope residual de solutos, (CDC, 2003; MORAWSKA, 2006). Em geral, microorganismos infecciosos apresentam dimensões entre 0,02 e 0,3 μm , para vírus, 0,3 a 10,0 μm , para esporos e células de bactérias, e 2,0 a 5,0 μm , para esporos de fungos (GROSSKOPF *et al*, 2012). Ambientes abrigados da radiação solar, com condições amenas de temperatura e umidade, permitem que estes microorganismos contidos no núcleo residual possam permanecer viáveis (CDC, 2003). Tais condições ambientais são encontradas em ambientes internos climatizados de hospitais e laboratórios.

O limite que separa as partículas implicadas na infecção aerotransportável, causada pelo núcleo residual de gotículas (*droplet nuclei*) da infecção por contato direto causada pelas gotículas maiores, está na ordem de grandeza de 10 µm para o diâmetro aerodinâmico médio mássico (MMAD – *mass median aerodynamic diameter*) (CDC, 2003; ASHRAE, 2014). Este diâmetro é definido como aquele para o qual 50% da massa total é composta por partículas com diâmetro maior, e 50% é composta por partículas com diâmetro menor.

A análise dos mecanismos de transporte para o *droplet nuclei* torna-se, portanto, fundamental para o entendimento da aerodispersão de infecções. Diversos autores especializados sinalizam que esta dispersão é consideravelmente influenciada pelo padrão de escoamento do ar no interior dos recintos (MEMARZADEH ,2009; YIN et al ,2009; MUI et al ,2009; XIAOPING et al ,2011; GROSSKOPF et HERSTEIN ,2012; BOLASHIKOV et al ,2012; MEMARZADEH et XU ,2012; FAULKNER et al ,2013; PANTELIC et THAM ,2013; CHEN et al ,2014). Assim, esta análise deve ser estendida a um estudo detalhado destes padrões de escoamento.

2.2. HISTÓRICO DE INFECÇÕES AEROTRANSPORTÁVEIS

RILEY *et* O'GRADY (1961) consideram que a opinião da comunidade científica sobre a eficiência do mecanismo de aerodispersão na transmissão de doenças variou ao longo dos séculos. Da extrema eficiência, nos primeiros séculos, para a extrema descrença, com o advento da microbiologia. ROY *et* MILTON (2004) dissertam sobre o paradigma inicialmente descrito por Charles Chapin em 1910, que sustentava a crença de que a maioria das infecções comunicáveis era transmitida por meio de gotículas, com alcance de poucos metros, ou através do contato direto com superfícies contaminadas.

Desde a década de 1930, estudos e experimentos de WELLS (1934) apontam para a efetiva transmissão aérea de algumas doenças, como TB (tuberculose) e sarampo.

Para a TB, até meados dos anos 1950, não havia estudos sobre a viabilidade de microorganismos no ar interior de ambientes habitados (RILEY *et* O'GRADY, 1961). As primeiras experiências foram realizadas por RILEY *et al* (1957) na ala de

tuberculose do hospital de veteranos de Baltimore (EUA). O hospital foi adaptado de modo que seu sistema de exaustão de ar induzisse a passagem do ar exaurido da ala de tuberculose por câmaras contendo animais de laboratório. Estes testes, que duraram 4 anos, demonstraram que a única explicação para a infecção por tuberculose nos animais era a viabilidade da aerodispersão dos bacilos. Um caso ocorrido em um navio da marinha norte-americana, que apresentava um paciente de tuberculose insuspeito, permitiu verificar que a contaminação por via aérea era o único meio de dispersão da infecção, e que o contato direto não representava um mecanismo de infecção (RILEY *et* O'GRADY, 1961). Atualmente, a tuberculose está bem caracterizada como uma doença contagiosa cuja disseminação por aerossol é obrigatória. Trata-se de uma doença cuja infecção, em condições naturais, só se inicia com a deposição do agente em áreas pulmonares profundas (ROY *et* MILTON, 2004). A Academia Nacional de Ciências Norte-Americana reconheceu esta caracterização em 1960 (EICKHOFF, 1996).

As evidências da aerodispersão do sarampo foram observadas através do método indireto, ou seja, pela observação da redução de casos em locais aonde havia a desinfecção do ar (RILEY *et* O'GRADY, 1961). Nos estudos de WELLS *et al* (1942), algumas escolas da Pensilvânia (EUA) foram dotadas de luminárias com lâmpadas *UVGI* (lâmpadas germicidas ultravioleta) na década de 1940. Observou-se que houve considerável redução dos casos nas escolas que possuíam estas soluções, com relação às escolas que não às possuíam. Os estudos foram conduzidos durante 5 anos. A possibilidade de contágio direto era a mesma para ambos os grupos de controle, o que evidenciou que a contaminação por via aérea era o principal meio de dispersão da infecção. RILEY *et* O'GRADY (1961) consideraram que estes estudos, não receberam, na época, o devido reconhecimento. Em 1980, durante novo simpósio sobre infecções aerotransportáveis, desta vez sobre a coordenação da Academia de Ciências de Nova-Iorque, ainda não se sabia se o modo de transmissão do sarampo era predominantemente por via aérea ou por contato direto (EICKHOFF, 1996). ROY *et* MILTON (2004) consideraram que o agente viral do sarampo se caracteriza pelo modo preferencial por via aérea. Trata-se de uma agente que pode naturalmente iniciar a infecção por múltiplas rotas, mas que é predominantemente transmitido por aerossóis depositados nas vias aéreas profundas.

As evidências da aerodispersão da Influenza foram observadas através do mesmo método usado no caso do Sarampo. Dois hospitais da Califórnia (EUA) foram estudados, sendo um equipado com luminárias UVGI, e outro não (controle) (RILEY *et* O'GRADY, 1961). Verificou-se que, durante a epidemia de Influenza de 1957, a dispersão da doença no hospital irradiado foi menor do que no grupo de controle (2% a 19%). Os dados não são tão consistentes quanto no caso do sarampo, já que o espaço amostral foi de um período curto (durante a epidemia). Estudos posteriores com cobaias de laboratório apontaram para evidências da aerodispersão da Influenza (RILEY *et* O'GRADY, 1961). Cobaias em celas fisicamente separadas, mas que compartilhavam o ar respirado, desenvolveram a doença. A taxa de infecção decrescia quando a taxa de ventilação aumentava, indicando o mecanismo de aerodispersão como preponderante (RILEY *et* O'GRADY, 1961). Os estudos permitiram verificar também que a umidade relativa do ar se apresenta como um importante fator na transmissão. A taxa de transmissão aumenta quando a umidade reduz. Tal conclusão foi recentemente ratificada por YANG *et* MARR (2011). Tal fato corrobora as observações da viabilidade dos vírus, e com os dados estatísticos de maior quantidade de casos no inverno. Acredita-se que o mesmo mecanismo seja válido para o organismo humano. ROY *et* MILTON (2004) reportam estudos epidemiológicos de alguns casos nos quais a transmissão aérea de Influenza ficou bem caracterizada. Atualmente, a WHO considera que a Influenza pode ser transmitida pela inalação de aerossóis contaminados, pelo contato direto e talvez pelo indireto (contato com superfícies contaminadas). A eficiência relativa de cada rota de transmissão ainda não foi definida (MEMARZADEH *et* XU, 2012).

A análise de um recente caso de epidemia de SARS em um condomínio na China sugeriu que esta doença apresenta um modo, pelo menos oportunístico, de transmissão por via aérea (ROY *et* MILTON, 2004). Esta epidemia demonstra o fato de que a transmissão aérea pode ser implicada de modo relativamente fácil em casos em que há uma fonte concentrada de finas partículas, e uma grande probabilidade de infecção em uma grande distância da fonte. Assim, como no caso da confirmação da transmissão aérea da tuberculose, a transmissão aérea de SARS não pode ser facilmente comprovada, mas também não pode ser totalmente descartada.

MORAWSKA (2006) considera que, apesar de todo o progresso científico, ainda há consideráveis questões acerca da transmissão de doenças por via aérea. Como exemplo, o autor cita o grau de desenvolvimento da ciência genética no entendimento da epidemiologia, patogenicidade e tratamento de infecções virais, em contraste com uma compreensão menor do que básica no entendimento do mecanismo de aerodispersão dos vírus. Segundo o autor, o entendimento da dinâmica do transporte e da sobrevivência dos vírus nas gotículas e no ambiente, o papel de fatores ambientais e da ventilação na sua dispersão ainda apresentam um pobre desenvolvimento.

ROY *et* MILTON (2004) consideram que o desenvolvimento de vacinas e drogas contra a Tuberculose e Sarampo, as duas doenças cujo modo de transmissão aéreo é melhor documentado, reduziu o ímpeto no estudo da aerobiologia de doenças infecciosas. A caracterização da contaminação de partículas finas aerotransportáveis também é consideravelmente complexa, dada a dificuldade da sua coleta e cultura.

ROY *et* MILTON (2004) observam ainda que a prática atual está na classificação da transmissão por aerossol como obrigatória, preferencial ou oportunística. Estes autores sustentam a tese de que existem muitas doenças com transmissão aérea oportunística. Tratam-se de infecções que naturalmente causam a doença através de outras rotas (ex. trato gastrointestinal), mas que também podem iniciar a infecção através das regiões pulmonares mais profundas, e que podem usar finas partículas aerossolizadas como um eficiente meio de propagação em ambientes favoráveis.

A maioria dos autores especializados (ROY *et* MILTON, 2004; SEWELL, 2006; YUGUO *et al*, 2015) sugerem que vários agentes podem apresentar risco relacionado à infecção oportunística por via aérea.

2.3. HISTÓRICO DE INFECÇÕES ASSOCIADAS À ATIVIDADE LABORATORIAL

Infecções associadas à atividade laboratorial (LAI – *laboratory acquired infections*) são documentadas desde o advento da atividade. Os trabalhos de WEDUM

(1964) e PIKE (1979) reúnem um histórico de incidentes em laboratórios dos Estados Unidos, Alemanha, Inglaterra, Rússia, e Brasil, ao longo do século 20. Os dois autores ressaltam a inalação de bioaerossol infeccioso como uma importante via de contaminação. Os dois autores também reportam uma grande incidência de casos de infecção sem que houvesse nenhum acidente associado. Nos casos associados aos acidentes, verifica-se a extensa área de contaminação que é alcançada, indicando-se o alto potencial de aerodispersão dos contaminantes. WEDUM (1964) relaciona um caso no qual a centrifugação de amostras de *brucella spp.* promoveu a aerodispersão dos contaminantes entre o laboratório, no sub-solo e ambientes localizados 3 pavimentos acima, causando a infecção de 94 pessoas. Em outro caso reportado, a quebra de ampolas de culturas liofilizadas de Encefalite Equina Venezuelana (EEV) numa escada promoveu a infecção de 24 pessoas nos pavimentos adjacentes. PIKE (1979) relata um caso ocorrido numa universidade norte-americana que resultou na infecção de 45 pessoas com *brucellosis*, com 1 caso fatal. Nenhum dos infectados manipulou culturas do agente, e a única explicação se refere à presença do laboratório de *brucellosis* no edifício. Nenhum dos trabalhos detalha as características do sistema de ventilação e de condicionamento de ar dos edifícios, de modo que não se pode realizar uma análise do seu papel nos incidentes. Cabe ressaltar que estes incidentes ocorreram numa época pregressa às primeiras normatizações e diretrizes sobre os aspectos de prevenção de acidentes em atividades realizadas em laboratórios. Estas se deram nos anos 70 a partir das publicações do CDC nos Estados Unidos (RAPPARINI *et* CARDO, 2005). SINGH (2009) reporta que os casos de LAI decresceram, a partir de 1965, em função de uma maior conscientização dos pesquisadores em relação ao risco da atividade, e à aplicação das diretrizes de biossegurança. Entretanto, estudos mais recentes sobre infecções associadas à atividade laboratorial, como os de SEWELL (2006) e KUPSKAY (2002), ainda ressaltam a incidência de LAIs e o risco associado a infecção por bioaerossol. KUPSKAY (2002) considera que um substancial número de LAIs ainda é encontrado, apesar de todo avanço científico e tecnológico. DI BERARDINIS *et al* (2013) relatam que 395 acidentes, envolvendo agentes selecionados pelo CDC, foram reportados a esta instituição, entre 2004 e 2010. SINGH (2009) e SEWELL (2006) mencionam que o maior número de LAIs é causado por agentes bacterianos. SINGH (2009) e SEWELL (2006) elencam alguns agentes para uma análise detalhada de riscos na manipulação,

em função do histórico de grande incidência de LAIs nos pesquisadores. Os agentes destacados, *brucella spp.*, *neisseria meningitidis*, *francisella tularensis*, *mycobacterium tuberculosis*, *SARS-CoV* e *bacillus anthracis* apresentam potencial de infecção via aerossol, e baixa dose infectante. Destaca-se que alguns procedimentos envolvendo estes agentes podem ser realizados no BSL-2, embora os autores destaquem que procedimentos com maior potencial de aerosolização devem ser realizados no interior de BSCs. Os autores também observam que alguns procedimentos específicos em certos agentes só podem ser realizados no BSL-3 (cultura do *m. tuberculosis*, *brucella spp.*, e *f. tularensis*). Entretanto, SEWELL (2006) considera que muitas infecções ocorrem porque a identificação tardia de um agente altamente infeccioso promove a execução inadvertida de procedimentos em bancada, que deveriam ser realizados no interior da BSC. CRANE & RILEY (1997) observam que os pesquisadores dos Laboratórios freqüentemente subestimam a natureza dos riscos ocupacionais, em função de sua familiaridade com a situação. KUPSKAY (2002), SEWELL (2006) e SINGH (2009) também consideram que o histórico de LAIs não é tão preciso pela falta de um programa integrado de reporte de acidentes.

2.4. CONTROLE DE INFECÇÕES EM LABORATÓRIOS

Para que uma infecção aconteça, é necessário que os seguintes elementos estejam presentes: o agente infeccioso e sua fonte, um receptor susceptível, e uma via de transmissão (ASHRAE, 2013a). A ocorrência da infecção depende do tempo de exposição, da virulência do agente, da quantidade de microorganismos e do nível de imunidade do receptor (ASHRAE, 2013a).

As vias de transmissão incluem, dentre outras, o contato direto ou indireto com gotículas contaminadas, e a inalação de aerossóis infecciosos (YUGUO *et al*, 2015; MORAWSKA, 2006). No caso do laboratório, estas partículas podem ser produzidas em processos cotidianos realizados em centrífugas, agitadores de alta velocidade, sonicadores e liofilizadores (DI BERARDINIS *et al*, 2013). Também podem ser geradas em procedimentos como a abertura de recipientes e destamponamento de placas de cultura, manipulação de seringas, preparo de amostras, vazamentos e derramamentos (KUPSKAY, 2002). A transmissão por via aérea de uma infecção só se torna viável se o

agente apresentar baixa dose infectante e se propagar através de partículas com tamanho suficientemente pequeno, de modo a permitir a penetração nas vias respiratórias mais profundas (ROY et MILTON, 2004). A faixa de tamanhos de partículas que apresenta maior risco de penetração no trato respiratório inferior (alvéolos) está entre $0,6\mu\text{m}$ e $2\mu\text{m}$ (ASHRAE, 2013a).

Os trabalhos de KENNY *et* SABEL (1968) e BENNETT *et* PARKS (2006) apresentam dados experimentais sobre as partículas geradas em acidentes laboratoriais que foram simulados em condições controladas. Os acidentes que geraram a maior concentração de contaminantes estão relacionados com a queda de frascos contendo soluções e com processos relacionados à centrifugação e agitação de amostras. Os diâmetros aerodinâmicos das partículas geradas nestes acidentes foram medidos, e eram suficientemente pequenos para que as mesmas ficassem em suspensão durante considerável tempo. Como exemplo, no experimento de BENNETT *et* PARKS (2006), um pequeno derrame de 10ml de uma solução contendo esporos no rotor de uma centrífuga de construção antiga promoveu, após a centrifugação, uma concentração no ar do ambiente da ordem de $10^4 \text{ CFU} \cdot \text{m}^{-3}$, com 90% das partículas com $d_p \leq 2,2\mu\text{m}$. Tais dados corroboram a afirmação de DI BERARDINIS *et al* (2013), de que equipamentos laboratoriais como centrífugas, sonificadores e agitadores podem gerar uma grande quantidade de partículas respiráveis, o que causa o risco de exposição a uma dose de infecção, quando trabalha-se com agentes biológicos patogênicos.

O programa de controle de infecções é tipicamente baseado numa hierarquia de estratégias, envolvendo controles administrativos, equipamentos de proteção individual (EPI) e coletiva (EPC), e controles de engenharia (CDC *et* NIH, 2007; YUGUO *et al*, 2015). Estas estratégias são estabelecidas de modo a interferir em um ou mais elementos necessários para que se estabeleça a infecção, de modo a minimizar o risco de sua ocorrência (RICHMOND *et* HOWARD, 1997).

No caso de laboratórios, este conjunto de estratégias de controle recebe o nome de nível de biossegurança (BSL). Os níveis de Biossegurança balizam as condições nas quais os agentes biológicos devem ser manipulados, contidos e descartados de forma segura. O conjunto de controles administrativos, EPIs, EPCs e controles de engenharia necessários para a realização de uma determinada atividade com manuseio, cultivo e

descarte de microorganismos de uma determinada classe de risco constitui o nível de biossegurança necessário ao laboratório em questão (RICHMOND *et* HOWARD, 1997). Este nível varia de 1 a 4 (BSL-1 a BSL-4), sendo crescente em grau de contenção e complexidade (RICHMOND *et* HOWARD, 1997).

Laboratórios BSL-1 são adequados para trabalho envolvendo agentes bem caracterizados, que não são reconhecidos por causar doenças em adultos saudáveis e que apresentam mínimo risco potencial ao pessoal do laboratório e ao meio ambiente (CDC *et* NIH, 2007). São basicamente usados no treinamento de estudantes de microbiologia (DI BERARDINIS *et al*, 2013).

Laboratórios BSL-2 são adequados para trabalho envolvendo agentes que apresentam moderado risco ao pessoal do laboratório e ao meio ambiente (CDC *et* NIH, 2007). Todos os procedimentos com potencial de formação de aerossol e de respingos devem ser realizados no interior de cabines de segurança biológica (BSC), ou outros equipamentos de contenção física (CDC *et* NIH, 2007). São os tipos mais comuns de laboratórios de microbiologia (DE LUGA, 1997).

Laboratórios BSL-3 são necessários para trabalho envolvendo agentes nativos ou exóticos com potencial risco de transmissão respiratória e que possam causar doença séria e potencialmente letal como resultado da exposição pela inalação (CDC *et* NIH, 2007). Todos os procedimentos com manipulação de agentes devem ser realizados no interior de BSCs (CDC *et* NIH, 2007).

Laboratórios BSL-4 são necessários para trabalho envolvendo agentes perigosos ou exóticos que apresentem um elevado risco de transmissão por aerossóis e que possam causar doença potencialmente letal, para a qual não há vacina ou tratamento (CDC *et* NIH, 2007). Deseja-se o total isolamento do agente, através do uso de BSCs classe III, ou através do uso de trajes pressurizados (DI BERARDINIS *et al*, 2013). Trata-se de uma instalação altamente sofisticada, e pouco comum. Existem apenas algumas instalações deste tipo nos EUA (DI BERARDINIS *et al*, 2013).

As principais barreiras de prevenção da geração de bioaerossol na manipulação de microorganismos em laboratórios são a conduta laboratorial (procedimentos) e o uso dos BSCs (cabines de segurança biológica) (WHO, 2004). A condução dos experimentos de acordo com os procedimentos minimizará a geração de bioaerossol na

zona respirável. O uso de BSCs compreende a técnica de isolamento da fonte e exaustão local. DE LUGA (1997) considera que a aplicação destes equipamentos é a forma mais eficaz de proteção do pesquisador contra bioaerossol gerado em laboratórios BSL-2. DI BERARDINIS *et al* (2013), consideram que as BSCs são os equipamentos de maior importância na segurança ocupacional em laboratórios com manipulação de agentes patogênicos.

Cabines de Segurança Biológica (BSCs) são equipamentos cuja função é a proteção do pesquisador, do material manipulado em seu interior, e do meio-ambiente externo (WHO, 2004). Tais proteções são garantidas pela manutenção de fluxo de ar unidirecional e da aplicação de filtragem com filtros HEPA (*High Efficiency Particulate Air*), cuja eficiência é de 99,97% para partículas com dimensão de 0,3 μm (WHO, 2004). A manutenção do fluxo unidirecional filtrado na bancada de trabalho (*downflow*) impede a contaminação da amostra pelo ambiente externo. O fluxo unidirecional interno induzido na abertura de trabalho da cabine (*inflow*) reduz o risco de saída de bioaerossol para o ambiente externo, protegendo o pesquisador. A filtragem de todo ar exaurido com filtros HEPA protege o Laboratório e o pesquisador.

Os requisitos técnicos das características construtivas, de desempenho e de certificação das cabines são ditados pela norma NSF/ANSI 49-2009: *Biosafety Cabinetry: Design, Construction, Performance, and Field Certification* (NSF/ANSI, 2009).

Os três tipos mais comuns aplicados em laboratórios de pesquisa biomédica são as cabines classe II-A1, classe II-A2 e classe II-B2 (RICHMOND *et* HOWARD, 1997). Estes três tipos são adequados para trabalho com microorganismos de classe de risco 1, 2 e 3 (sendo que para uso com organismos da classe 3, a BSC deve ser semestralmente certificada) (WHO, 2004). Uma diferenciação operacional importante está na possibilidade de manipulação de produtos químicos e radionucleicos voláteis em seu interior (ASHRAE, 2003, WHO, 2004).

A cabine classe II-A1 apresenta recirculação de 70% do ar em seu interior e expurgo de 30% do ar filtrado no interior do laboratório (ASHRAE, 2003). Não permite a manipulação de produtos químicos e radionucleicos voláteis em seu interior (WHO,

2004). Este tipo de cabine apresenta o benefício de não utilizar exaustão para o exterior, reduzindo o impacto energético de sua aplicação.

A cabine classe II-A2 é similar a classe II-A1, com a diferença de que o plenum de descarga se encontra em pressurização negativa (à montante do ventilador), e com uma velocidade de face maior. Também permite, em uma configuração especial, que a vazão de descarga (30% da vazão de expurgo) seja exaurida para o meio-ambiente exterior (ASHRAE, 2003). Esta configuração especial permite a manipulação de quantidades mínimas de produtos químicos e radionucleicos voláteis em seu interior (WHO, 2004). Quando de sua aplicação, a cabine não deve ser rigidamente conectada ao duto de exaustão (ANSI/AIHA/ASSE, 2012, NIH, 2016, RICHMOND *et* HOWARD, 1997). Deve ser prevista uma coifa imediatamente acima de sua conexão de descarga, envolvendo-a totalmente com uma folga determinada, de forma que o desligamento da cabine apresente mínimo impacto na pressurização do laboratório, já que a exaustão do ar pela coifa continua a retirar ar do recinto. O sistema de condicionamento de ar deve ser dimensionado para manipular uma vazão de ar-exterior compatível com a demanda de extração da cabine. A aplicação deste tipo de cabine apresenta um impacto energético maior do que a aplicação da cabine classe II-A1, em função da demanda de exaustão.

A cabine classe II-B2 opera em regime de 100% de expurgo para o exterior (ASHRAE, 2003). Permite a manipulação de produtos químicos e radionucleicos voláteis em seu interior (WHO, 2004). Quando de sua aplicação, a mesma deve ser rigidamente conectada ao duto de exaustão (ANSI/AIHA, 2003, NIH, 2016, RICHMOND *et* HOWARD, 1997). Controles e intertravamentos devem ser aplicados visando evitar que o desligamento da cabine apresente impactos na pressurização do laboratório. O sistema de condicionamento de ar deve ser dimensionado para manipular uma vazão de ar-exterior compatível com a demanda de extração da cabine. Tais características implicam numa maior complexidade técnica e num maior impacto energético na aplicação deste tipo de cabine (RICHMOND *et* HOWARD, 1997).

As cabines classe III são equipamentos totalmente enclausurados, mantidos em pressurização negativa, cuja manipulação interna se dá através de luvas especiais (glovebox). Fornecem o mais elevado nível de proteção, mas apresentam alto custo e

complexidade, motivo pelo qual são geralmente aplicáveis nos laboratórios BSL-4 (DI BERARDINIS *et al*, 2013).

Finalmente temos o sistema de ventilação mecânica e de condicionamento de ar (HVAC, *heating, ventilation and air conditioning*) do laboratório, que faz parte das barreiras secundárias de contenção, sendo os procedimentos e uso das CSB as barreiras primárias.

A ASHRAE (2013a) define o sistema de condicionamento de ar como um conjunto de equipamentos destinados ao tratamento do ar, de forma a controlar simultaneamente sua temperatura, umidade, pureza e distribuição no ambiente.

Este sistema regula diversos mecanismos que influenciam diretamente a concentração de bioaerossol em suspensão no ar dos laboratórios, como a diluição dos contaminantes em suspensão (YUGUO *et al*, 2015), a filtragem do ar (NAZAROFF, 2004), o regime de escoamento do ar na sala e a taxa de deposição de partículas nas superfícies (ZHAO *et al*, 2007), e a pressurização relativa entre ambientes (YUGUO *et al*, 2015). Este sistema também controla a temperatura e a umidade dos laboratórios, fundamental para a manutenção do conforto térmico dos ocupantes (DI BERARDINIS *et al*, 2013). Concluímos que o papel do sistema de condicionamento de ar de laboratórios é fundamental no controle dos contaminantes aéreos, no conforto e na segurança dos pesquisadores.

2.5. ESTUDOS PREGRESSOS DE AERODISPERSÃO DE CONTAMINANTES EM AMBIENTES INTERNOS

Analisando-se os estudos pregressos publicados, verifica-se que estes se dividem em dois tipos: Estudos baseados em experimentos e em simulações numéricas. Os estudos experimentais foram realizados em câmaras de testes especialmente construídas e instrumentadas para simular e medir a aerodispersão de contaminantes em seu interior. Grande parte das simulações numéricas usou a técnica de CFD (*computational fluid dynamics*) para a modelagem do escoamento do ar e do transporte de contaminantes nos casos estudados. Observa-se que a maioria dos estudos numéricos utilizou dados de estudos experimentais para validação do modelo.

Verifica-se, entretanto, uma quantidade relativamente pequena de estudos aplicados a acidentes em laboratórios. DI BERARDINIS *et al* (2013) consideram que a pesquisa usando-se técnicas de CFD para auxiliar o projeto de laboratórios ainda é relativamente rara.

A grande maioria dos trabalhos previamente publicados analisa a aerodispersão de contaminantes gerados pelos ocupantes de ambientes hospitalares e comerciais, com foco no potencial de disseminação de doenças. Estes estudos foram incluídos, apesar de possíveis diferenças, com objetivo de reforçar a base teórica necessária ao estudo e análise da aerodispersão de contaminantes em um ambiente interno. As possíveis diferenças podem estar nas características dimensionais dos contaminantes, nas condições de liberação, e nas características do sistema de HVAC destas aplicações, em relação à aplicação laboratorial.

Com relação aos trabalhos específicos à aplicação laboratorial, destacam-se os de MEMARZADEH (1996, 1998, 2009), KOLESNIKOV (2006), e GILL-LOPEZ *et al* (2013). Estes trabalhos envolveram simulações numéricas, utilizando-se a técnica de CFD. O primeiro trabalho de MEMARZADEH (1996) se propôs a estudar a contenção de contaminantes em capelas de exaustão química em laboratórios, quantificada através de um fator de vazamento de contaminantes. No segundo, MEMARZADEH (1998) estudou o desempenho de salas de animais de laboratório no controle de exposição dos ocupantes aos contaminantes gasosos por eles emitidos (basicamente CO_2 e NH_3). Ambos os estudos foram baseados em diversas configurações modeladas, com diferentes características de modos de ventilação, taxas de renovação do ar da sala e de posicionamento de dispositivos de insuflação e de exaustão. As conclusões dos estudos reúnem recomendações técnicas sobre o melhor posicionamento destes dispositivos no ambiente e sobre soluções técnicas de distribuição de ar que devem ser evitadas. As conclusões do 2º estudo levaram o autor a sugerir que o controle de umidade relativa da sala de animais de laboratório é um fator mais importante do que a taxa de renovação de ar, no controle de exposição à amônia (MEMARZADEH, 1998). No terceiro trabalho, MEMARZADEH (2009) analisou a influência da taxa de renovação de ar de um laboratório no risco potencial de exposição dos seus ocupantes a um acidente químico hipotético, com liberação de contaminantes gasosos. A sala foi modelada com 100% de

renovação de ar exterior (sem recirculação). O estudo analisou a evolução da concentração dos contaminantes gasosos na zona respirável, em duas posições do laboratório, a partir de dois pontos de lançamento dos contaminantes. Foi analisada a influência da taxa de renovação do ar da sala e do posicionamento dos dispositivos de exaustão na concentração resultante na zona respirável. Foram estudadas taxas de renovação entre 6 e 14 ACH, e o sistema de distribuição de ar foi modelado de modo a representar o modo de ventilação por mistura, MV (*mixed ventilation*). Os resultados demonstraram que, a partir de um determinado limite, o aumento da taxa de renovação do ar não correspondeu a reduções na concentração na zona respirável, e que se estabeleceram consideráveis gradientes de concentração na sala. O autor ressalta a influência do padrão de escoamento do ar na sala, e considera que não há uma relação direta entre o aumento da taxa de ventilação e a segurança ocupacional. Dados os altos custos operacionais deste tipo de sistema, o autor sugere que se adotem valores menores para a taxa de ventilação, da ordem de 6 ACH, ao invés dos tradicionais 12 ACH. Os trabalhos de KOLESNIKOV (2006) e GILL-LOPEZ *et al* (2013) ressaltam o potencial de aplicação da técnica CFD na análise de riscos e de soluções de projeto. De acordo com os autores, dada a evolução dos recursos computacionais, esta técnica poderia ser usada durante a fase de projeto dos laboratórios para avaliar e melhorar o desempenho dos controles de engenharia. Como exemplo de aplicação, o trabalho de KOLESNIKOV (2006) procurou modelar a dispersão de um contaminante gasoso hipotético inserido em uma sala limpa farmacêutica pelo sistema de ventilação. O trabalho de GILL-LOPEZ *et al* (2013) procurou estudar o efeito da taxa de renovação de ar de um laboratório no percentual de ocupantes desconfortáveis (PPD). Este trabalho sugere que a técnica de CFD poderia ser aplicada na otimização da taxa de renovação, de modo a estabelecer, para cada situação específica, a taxa que promove o menor valor de PPD.

Existem vários trabalhos que procuraram estudar a aerodispersão de contaminantes gerados pelos ocupantes de ambientes hospitalares e comerciais. YIN *et al* (2009), GROSSKOPF *et al* HERSTEIN (2012), BOLASHIKOV *et al* (2012), e MEMARZADEH *et al* XU (2012) procuraram analisar a aerodispersão de contaminantes gerados por pacientes no interior de quartos de isolamento para doenças respiratórias (AIIR – *airborne infection isolation rooms*). MUI *et al* (2009), XIAOPING *et al* (2011), NIELSEN *et al* (2012), PANTELIC *et al* THAM (2012, 2013), e CHEN *et al* (2014)

procuraram analisar a aerodispersão de contaminantes em ambientes comerciais, gerados pelos ocupantes. Nestes trabalhos, os contaminantes estudados foram formados pelo resíduo de gotículas (*droplet nuclei*), potencialmente contaminadas por microorganismos patogênicos implicados na transmissão de doenças pulmonares. Estas gotículas são normalmente exaladas pelos ocupantes através da atividade respiratória, e mecanismos como a tosse e o espirro.

Os estudos experimentais de YIN *et al* (2009) foram conduzidos em uma câmara de testes, construída em escala real, para modelar um AIIR, no interior de um galpão mantido em condições ambientais estáveis. A liberação dos contaminantes teve por objetivo modelar a exalação a partir da respiração normal do paciente do AIIR. Foram realizados testes usando-se partículas monodispersas de 1 μm , de 3 μm , e um gás traçante, SF_6 (hexafluoreto de enxofre). O sistema de ventilação permitiu a modelagem do desempenho de diferentes modos de ventilação nesta dispersão. Foram modelados os modos de ventilação por deslocamento (DV, *displacement ventilation*) e por mistura (MV, *mixed ventilation*), com taxas de renovação de ar de 4 e 6 ACH, e sobre diferentes configurações de posicionamento do dispositivo de exaustão de ar. O estudo permitiu verificar que a posição deste dispositivo apresenta considerável influência na concentração dos contaminantes na zona respirável, para o modo DV. A aplicação do modo DV com taxa de 6 ACH apresentou o melhor desempenho na capacidade de minimizar a concentração de contaminantes na sala. O estudo também permitiu verificar que o uso de um gás traçante, como o SF_6 , pode ser aplicável para simular as partículas de dimensões de alguns micrometros, no estudo de sua aerodispersão. Os autores consideram que seus resultados também podem servir para validação de programas de CFD.

Os estudos experimentais de GROSSKOPF *et* HERSTEIN (2012) foram realizados em um quarto AIIR de um hospital existente. O quarto AIIR utilizado apresentava sistema de climatização dedicado, com taxa de renovação de ar exterior fixa de 2,5 ACH, e modo de ventilação por mistura (MV). Os contaminantes foram inseridos através da aerossolização de PAO (polialfaoleofina) sintético, numa taxa compatível com a geração associada à respiração normal de um ocupante. A concentração em diversos pontos foi medida e registrada ao longo do período de realização dos testes, no

qual as condições ambientais permaneceram relativamente constantes. Os resultados mostraram que distribuição das partículas com $d_p < 1\mu m$ apresentou uma menor dependência dos padrões de escoamento de ar, difundindo-se de forma relativamente homogênea por todo o domínio, durante todo o período dos testes. As partículas com $d_p \geq 1,0\mu m$ apresentaram distribuição não-uniforme, e fortemente dependente dos padrões locais de escoamento do ar. Os testes permitiram verificar que a turbulência causada pela abertura e fechamento da porta promoveu a dispersão das partículas para o corredor, no exterior do ambiente de teste, e que esta dispersão foi mais pronunciada para as partículas com $d_p \geq 1,0\mu m$.

Os estudos experimentais de BOLASHIKOV *et al* (2012) foram realizados em uma câmara de testes, construída para estudar a aerodispersão de partículas geradas por pacientes em quartos AIIR com modo de ventilação por mistura (MV). Os contaminantes foram inseridos a partir de um gerador de aerossol, projetado para simular a tosse de um paciente. Um manequim térmico foi utilizado para simular a presença de outro ocupante na sala. O estudo procurou analisar a influência da posição relativa entre o emissor e o receptor, em diferentes orientações de emissão, e sob diferentes taxas de ventilação. As taxas de ventilação estudadas foram de 3, 6 e 12 ACH. As análises demonstraram que a orientação relativa entre direção do emissor e receptor apresenta considerável influência no risco de exposição do receptor. Os casos em que a emissão dos contaminantes se processou com orientação direta ao receptor apresentaram concentrações 50 vezes maior do que naqueles em que a orientação era rotacionada em 90° com relação ao receptor. Os resultados demonstraram que o risco de exposição aumenta com a proximidade da fonte emissora. Os maiores riscos foram avaliados para a menor distância estudada, de 0,55m. Ao contrário das expectativas, verificou-se uma maior concentração de contaminantes para a taxa de ventilação de 12 ACH do que para as taxas de 3 e 6 ACH, para o caso em que a distância entre fonte emissora e receptor era de 1,1m. Os autores consideram que isto ocorreu em função das características do escoamento local do ar, que influenciam nos mecanismos de transporte de contaminantes, e que são alterados com o aumento da taxa de ventilação da sala.

O trabalho de MEMARZADEH *et al* (2012) envolveu simulações numéricas, utilizando a técnica de CFD, com objetivo de modelar a aerodispersão de contaminantes de 5 μm no interior de um quarto AIIR, com modo de ventilação por mistura (MV). O quarto foi modelado com 100% de renovação de ar exterior (sem recirculação), compatível com as normas norte-americanas para esta aplicação. A modelagem se propôs a representar a geração de contaminantes pelo paciente em dois regimes: permanente (exaladas pela respiração normal) e transiente (liberadas em uma tosse). Foi analisada a influência da taxa de renovação do ar da sala e do tipo e posicionamento dos dispositivos de insuflação e exaustão na concentração resultante na zona respirável. Os resultados demonstraram que o simples aumento da taxa de renovação do ar não corresponde necessariamente a uma menor concentração na zona respirável, caso a eficiência de distribuição de ar na zona seja baixa. Esta eficiência, definida neste caso como a taxa entre a concentração na exaustão e na zona respirável, é altamente dependente do padrão de escoamento na sala e do arranjo dos dispositivos de insuflação e exaustão. Os autores ressaltam que o parâmetro mais importante a ser alcançado num ambiente interno com ventilação mecânica, de modo a minimizar o risco de exposição, é a provisão de um campo de velocidades que minimize a perturbação da trajetória dos contaminantes entre a fonte e o dispositivo de exaustão. Esta estratégia, nomeada pelos autores como “princípio da trajetória”, reduz a concentração na zona respirável, por promover alta eficiência de distribuição de ar.

MUI *et al* (2009) usaram a técnica de CFD para estudar a aerodispersão de partículas de 0,01 e 10 μm geradas pela tosse de um ocupante de uma sala sobre os modos de ventilação por deslocamento (DV, *displacement ventilation*) e mistura (MV, *mixed ventilation*). A modelagem se propôs a representar a liberação dos contaminantes com três velocidades iniciais (20, 50 e 100 m/s), em regime transiente. A taxa de ventilação era fixa e constante, e o estudo também procurou analisar a influência da orientação relativa entre o emissor e um receptor, também localizado na sala. Os resultados mostraram que esta orientação relativa apresenta diferenças no desempenho do regime DV, que podem vir a minimizar o risco do receptor. Os resultados também mostraram que, para o caso do modo de ventilação tradicional por mistura (MV), esta orientação não influencia na concentração resultante na zona respirável, que sempre se aproxima de uma distribuição homogênea. Já o modo de ventilação por deslocamento

(DV) promove altos gradientes de concentração na direção vertical, o que favorece a aplicação de dispositivos de desinfecção do ar, como lâmpadas UVGI, junto ao teto do ambiente.

O trabalho de XIAOPING *et al* (2011) envolveu simulações numéricas, utilizando a técnica de CFD, para estudar a aerodispersão de partículas de 1, 5 e 10 μm geradas pelo ocupante de um escritório sobre diferentes modos de ventilação: por mistura (MV), por deslocamento (DV) e pelo piso (UFAD, *underfloor air distribution*). A taxa de renovação do ar era fixa e constante, igual a 6,4 ACH. A modelagem se propôs a simular a dispersão de contaminantes gerados pelo ocupante em dois regimes: permanente (exaladas pela respiração normal) e transiente (liberadas em uma tosse). O estudo procurou analisar a influência do modo de ventilação na dose de contaminantes inalados por um segundo ocupante do escritório, denominado receptor. Para a geração de contaminantes da respiração normal, os resultados mostraram que a aplicação de uma distância mínima entre os ocupantes poder vir a minimizar a dose inalada, para os regimes DV e UFAD. Para todos os tamanhos de partícula, a dose total inalada é maior para o regime MV, e menor para o DV. Para a geração de contaminantes oriunda da tosse, os resultados demonstram que o regime DV apresenta um melhor desempenho global na minimização da dose inalada, quando o tamanho de partícula é menor do que 5 μm .

NIELSEN *et al* (2012) usaram métodos experimentais para estudar a aerodispersão de partículas menores do que 5 μm geradas de modo a simular a exalação média a partir da respiração normal do ocupante de uma sala, com modo de ventilação por deslocamento (DV). A taxa de ventilação estudada foi de 5,6 ACH (fixa). O estudo procurou analisar a influência da distância entre os ocupantes da sala na dose de contaminantes inalados pelo segundo ocupante do ambiente. Os ocupantes foram modelados como manequins térmicos. Os resultados demonstraram que o risco de infecção cresce de modo inversamente proporcional com a distância entre os ocupantes. Este risco é consideravelmente alto quando a distância é menor do que 80cm, e também é altamente dependente da orientação relativa entre os ocupantes. Os resultados mostraram que a estratificação térmica proporcionada pelo modo DV e a pluma térmica criada pela dissipação de calor do ocupante pode fazer com que a dose inalada chegue a

valores relativamente elevados, quando os ocupantes encontram-se numa orientação face a face, e muito próximos. Os autores estimam que, neste caso, o valor pode ser 12 vezes maior do que no caso de mistura perfeita, quando a distância entre os ocupantes é de 35cm.

PANTELIC *et* THAM (2012, 2013) publicaram dois trabalhos, nos quais usaram métodos experimentais para analisar os limites do modo de ventilação por mistura (MV, *mixed ventilation*) na prevenção da aerodispersão de infecções em um ambiente de escritório fechado, a partir de um caso inicial. Nos dois trabalhos, o recinto foi modelado em uma câmara de testes, o ocupante foi modelado por meio de um manequim térmico, e os contaminantes foram inseridos na sala por meio de um gerador de aerossol polidisperso, com tamanho de partículas de 0,3 a 20µm, em diferentes localizações e orientações. No primeiro trabalho (PANTELIC *et* THAM, 2012), a partir dos dados experimentais, as análises foram complementadas pela solução analítica da equação de Wells-Riley¹ de modo a estimar o número médio esperado de infecções resultantes, em função do tempo de exposição e da dose média inalada. Esta dose foi estimada em função da média das concentrações medidas na câmara de testes utilizada, junto ao manequim térmico (que modelava o ocupante). As análises demonstraram que o número esperado de infecções resultantes depende basicamente da intensidade da fonte emissora, do tempo de exposição e da taxa de ventilação do ambiente. Observou-se que o aumento da taxa de ventilação a valores entre 3 e 6 ACH apresentou grande redução no número esperado de infecções, para valores moderados de intensidade da fonte emissora e de tempo de exposição. O aumento da taxa acima destes valores não promoveu melhorias consideráveis na redução do número de casos. Os autores observam também que há limites na capacidade do modo de ventilação por mistura (MV) na prevenção da aerodispersão da infecção, principalmente se o tempo de exposição for longo, e se a intensidade da fonte emissora for alta. Entretanto, é ressaltado que o uso da ventilação, dentro das taxas racionais mencionadas, apresenta

¹ Equação que expressa a probabilidade de um indivíduo suscetível infectar-se pela inalação de uma determinada dose (expressa em quanta) de microorganismos. Oriunda do modelo de Wells (1955) e Riley *et al* (1978).

papel fundamental na prevenção da infecção em curtos períodos de exposição. O objetivo do segundo trabalho de PANTELIC *et al* THAM (2013) foi de analisar a efetividade do aumento da taxa de ventilação de 6 para 12 ACH na redução da concentração de contaminantes. Os resultados mostraram que esta concentração, em alguns locais, aumentou com o aumento da taxa de ventilação. Os autores consideram que isto ocorreu em função das características do campo de velocidades, que apresentaram uma área de fluxo altamente irregular no caso de 12 ACH. Os resultados demonstram que os padrões locais de escoamento influenciam consideravelmente a aerodispersão de contaminantes. Os resultados também demonstram que a taxa de renovação não deve ser utilizada como único indicador do desempenho do sistema de HVAC no potencial de redução da exposição dos ocupantes aos contaminantes aerodispersíveis.

CHEN *et al* (2014) usaram métodos numéricos, utilizando a técnica de CFD, para estudar a aerodispersão de partículas de modo a simular o potencial de infecção de pessoa a pessoa em um ambiente de escritório. Foi estudado o potencial de redução de exposição em função do modo de ventilação, taxa de renovação de ar e distância de pessoa a pessoa. Os modos de ventilação estudados foram o MV (*mixed ventilation*), DV (*displacement ventilation*) e UFAD (*underfloor air distribution*). O código foi previamente validado em função de dados experimentais disponíveis na literatura. Os resultados mostraram que a distância de pessoa a pessoa apresenta alta influência no potencial de exposição, e que este potencial aumenta consideravelmente, de modo inversamente proporcional à distância, para distâncias menores do que 1,1m. O desempenho dos modos de ventilação DV e UFAD apresentaram resultados similares, e promoveram um potencial médio de redução de exposição de 20% em relação ao modo MV. Os autores concluem que a taxa de ventilação apresenta potencial limitado de redução da exposição, em função da relação não-linear entre o aumento da taxa de renovação e a redução do potencial de exposição.

O trabalho de FAULKNER *et al* (2013) teve por objetivo aplicar a lógica fuzzy em dados experimentais, para estudar a correlação entre o aumento da taxa de renovação de ar com a concentração de partículas na zona ocupada. Os dados experimentais foram coletados em uma câmara de testes, construída em escala reduzida,

dotada de ventilação por mistura (MV). A concentração de partículas no fluxo de entrada foi regulada de modo a permanecer praticamente constante, de modo que a quantidade de partículas injetada na câmara crescesse na medida em que a taxa de renovação aumentasse entre 2 e 14 ACH. A concentração no fluxo de saída cresceu de modo essencialmente linear com o aumento da taxa de renovação. A concentração na zona ocupada não cresceu linearmente com o aumento da taxa de renovação. O uso dos valores mais elevados da taxa de renovação (entre 6 e 14 ACH) não apresentou reduções na concentração da zona ocupada. Os autores apresentam algumas limitações do estudo, com relação à simplicidade do modelo. Apesar disto, os autores recomendam que há limites na vantagem de se aumentar a taxa de renovação de ar de uma sala, dotada de ventilação mecânica, com objetivo de se melhorar as condições ambientais na zona ocupada. Eles concluem que outros estudos são necessários para identificar a influência da localização da fonte de partículas e do tipo de distribuição de ar da sala nos resultados.

Os trabalhos de WANG *et al* (2012) e BENNETT *et al* (2013) introduziram metodologias que, acopladas a dados experimentais ou numéricos de aerodispersão de contaminantes, possam ser aplicadas na estimativa do paciente zero de uma epidemia.

WANG *et al* (2012) demonstraram a aplicabilidade da técnica CFD, acoplada a um método probabilístico, para estudar a aerodispersão de partículas e determinar o paciente zero de uma epidemia de SARS em uma ala hospitalar. O método calcula, para cada ponto do domínio, a probabilidade deste ponto ser a fonte emissora, em função de alguns dados de entrada. Estes dados são o campo de velocidades e a concentração de contaminantes em alguns pontos. A concentração poder ser estimada pela equação de Wells-Riley, em função do número e posição de pessoas infectadas. O método apresentou bom desempenho, quando aplicado ao caso real da epidemia de SARS ocorrida em uma ala hospitalar em Hong-Kong. Verificou-se que a acurácia na estimativa da concentração não é tão relevante para o sucesso do método, desde que os dados de localização no domínio sejam coerentes. Os autores reforçam o potencial da aplicação deste método, a partir dos primeiros dados epidemiológicos disponíveis, para auxílio no controle de uma epidemia em um ambiente fechado e climatizado.

BENNETT *et al* (2013) criaram um método estatístico para analisar o potencial de aerodispersão de partículas infecciosas no interior de cabines de aviões comerciais. O método utiliza dados experimentais coletados em câmaras de testes, a partir da aerodispersão de CO_2 , particulado de talco e de gotículas contendo *Lactococcus Lactis*. Os resultados mostram que a distância a partir da fonte de contaminantes pode reduzir consideravelmente o risco de exposição. O modelo apresentou bom resultado quando validado a partir dos dados reais de infecção de SARS em um voo comercial, em 2003. Os autores consideram que o método pode vir a ser aplicado para decisão de medidas de vigilância de passageiros, a partir dos primeiros dados de uma nova infecção potencialmente epidêmica.

3. ESCOAMENTO DO AR EM AMBIENTES INTERNOS

3.1. EQUAÇÕES GOVERNANTES

O escoamento de um fluido Newtoniano é governado por um conjunto de equações diferenciais parciais representando a conservação de massa, quantidade de movimento (equações de Navier Stokes) e energia. Estas equações, para um referencial estacionário, na formulação Euleriana, podem ser escritas, na forma diferencial para um ponto, como:

a) Conservação de Massa:

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0. \quad (3.1)$$

b) Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\partial (\rho \mathbf{u}) / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g}. \quad (3.2)$$

c) Conservação da Energia (interna térmica):

$$\partial (\rho e) / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) = -P \nabla \cdot \mathbf{u} + \Phi_v + \nabla \cdot (k \nabla T). \quad (3.3)$$

Onde o termo de dissipação viscosa de energia é dado por:

$$\Phi_v = 2\mu S_{ij} S_{ij}. \quad (3.4)$$

Para esta formulação, o ponto é definido como um elemento do domínio de dimensões infinitesimais, que são muito menores do que as escalas envolvidas no

escoamento, mas ainda suficientemente maiores do que as escalas microscópicas, de modo a garantir a premissa do contínuo (POPE, 2000). As menores escalas de tempo do escoamento são suficientemente maiores do que a escala de tempo das interações microscópicas, de modo a permitir a premissa de um equilíbrio termodinâmico local.

Para a classe de problemas do escoamento do ar em ambientes internos, algumas simplificações podem ser adotadas:

- a) O ar é considerado como um gás ideal (equação de estado termodinâmico);
- b) As velocidades de escoamento são suficientemente baixas ($Mach \ll 0,3$), de modo a garantir a premissa de escoamento incompressível. Os termos associados ao trabalho de compressão são nulos;
- c) As diferenças de temperatura são suficientemente baixas (aproximadamente $10^\circ C$), de modo que a premissa de propriedades constantes pode ser adotada para a massa específica, viscosidade, condutividade térmica e calor específico. A hipótese de Boussinesq é utilizada para modelar o efeito do empuxo térmico, oriundo da variação de massa específica, como um termo fonte, apenas nas equações de quantidade de movimento.
- d) O ar é considerado transparente à radiação, e o modo de transferência de calor associado é a condução.
- e) O termo dissipativo de conversão de energia mecânica pela ação viscosa (atrito) em calor é muito menor do que o termo de condução de calor, e por isto, é desprezível.

Com a aplicação destas premissas, as equações governantes assumem a seguinte forma:

- a) Conservação de Massa:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 . \quad (3.5)$$

- b) Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + S_{M,\rho} . \quad (3.6)$$

- c) Conservação da Energia (interna):

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T . \quad (3.7)$$

No caso da equação da conservação da quantidade de movimento (3.6), é adicionado um termo fonte, $S_{M,\rho}$, na direção vertical (vetor unitário \mathbf{e}_3), para modelagem do empuxo térmico através da hipótese de Boussinesq. Este termo fonte é modelado por:

$$S_{M,\rho} = (\rho_0/\rho)\beta g(T - T_0)\mathbf{e}_3 . \quad (3.8)$$

As equações diferenciais governantes demandam a especificação das condições iniciais e de contorno. As condições iniciais são estabelecidas pela especificação dos campos de velocidade e temperatura em $t=0s$:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_o(\mathbf{x}) . \quad (3.9)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_o(\mathbf{x}) . \quad (3.10)$$

As condições de contorno envolvem:

- i) a especificação dos perfis de velocidade e temperatura (condições de 1º tipo - *Dirichlet*) nas superfícies de contorno de entrada de ar (Γ_{inlets}):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \text{ em } \Gamma_{inlets} . \quad (3.11)$$

$$T(\mathbf{x}, t) \text{ em } \Gamma_{inlets} . \quad (3.12)$$

- ii) a especificação do perfil de velocidade ou pressão (condições de 1º tipo - *Dirichlet*) e derivada normal nula de temperatura (condições de 2º tipo - *Neumann*) nas superfícies de contorno de saída de ar ($\Gamma_{outlets}$):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \text{ ou } P(\mathbf{x}, t) = P_0 \text{ em } \Gamma_{outlets} . \quad (3.13)$$

$$\nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ em } \Gamma_{outlets} . \quad (3.14)$$

- iii) a especificação das condições de não-escorregamento (*no slip*) e impenetrabilidade (condições de 1º tipo - *Dirichlet*) nas paredes (Γ_{walls}):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ em } \Gamma_{walls} . \quad (3.15)$$

- iv) a especificação dos fluxos de calor nas paredes, através da derivada normal de temperatura (condições de 2º tipo - *Neumann*):

$$\nabla T(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} = f_0 \text{ em } \Gamma_{walls} . \quad (3.16)$$

Onde $f_0 = 0$ para as paredes adiabáticas.

3.2. MODELAGEM DA TURBULÊNCIA

3.2.1. CONTEXTUALIZAÇÃO E EQUAÇÕES RANS

As equações apresentadas na seção anterior descrevem o escoamento de fluidos em regime laminar e turbulento. Entretanto, o escoamento do ar em ambientes internos é geralmente caracterizado por um escoamento turbulento de baixa velocidade, em regime transiente, em função das flutuações de velocidade (LIANG, 1994). Para uma descrição completa deste regime de escoamento, um intervalo muito pequeno de integração no tempo e no espaço seria necessário, da ordem do menor período das flutuações turbulentas e das escalas de *Kolmogorov*, respectivamente. Devido a complexidade envolvida, não se torna geralmente necessária a descrição de todos os detalhes da turbulência, para a maioria das aplicações de engenharia (VERSTEEG *et al* MALALASEKERA, 2007). Em sua revisão bibliográfica sobre a modelagem de turbulência, ZHAI *et al* (2007) consideram que, para o estudo do escoamento do ar em ambientes internos, o uso das médias temporais das variáveis de campo é suficiente para as análises, o que permite o uso de uma formulação como a das Equações de Navier Stokes com Média de Reynolds (RANS, *Reynolds Averaged Navier Stokes*), com um modelo de turbulência. Esta formulação, adotada nesta tese, é obtida pela média temporal das equações de Navier Stokes, utilizando-se a decomposição de Reynolds. Esta decomposição considera que o valor instantâneo de qualquer variável de campo ϕ , com respeito às flutuações turbulentas, possa ser expressa pela soma de duas componentes: sua média temporal Φ (constante) e sua flutuação instantânea ϕ' :

$$\phi = \Phi + \phi' . \quad (3.17)$$

A média temporal, para uma variável de campo $\phi(\mathbf{x}, t)$ é definida pela equação (3.18):

$$\Phi = \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0+\tau} \phi(\mathbf{x}, t) dt . \quad (3.18)$$

Onde τ é um intervalo de tempo suficientemente longo.

Assim, a velocidade, pressão e temperatura podem ser descritos por:

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}' . \quad (3.19)$$

$$p = P + p' . \quad (3.20)$$

$$T = \bar{T} + T' . \quad (3.21)$$

Após a inclusão destas hipóteses nas equações governantes (3.5 a 3.7), e obtenção de sua média temporal, as mesmas podem ser escritas na forma RANS:

d) Formulação RANS para Equação da Conservação de Massa:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 . \quad (3.22)$$

e) Formulação RANS para Equação da Conservação de Quantidade de Movimento:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{U} - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}) + \bar{S}_{M,\rho} . \quad (3.23)$$

f) Formulação RANS para Equação da Conservação da Energia (interna):

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \bar{T} = \alpha \nabla^2 \bar{T} - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}' T'}) . \quad (3.24)$$

O termo de empuxo térmico é modelado por:

$$\bar{S}_{M,\rho} = (\rho_0/\rho) \beta g (\bar{T} - \bar{T}_0) \mathbf{e}_3 . \quad (3.25)$$

Os novos termos turbulentos que surgem magnificam a difusividade de quantidade de movimento e de calor, aumentando o estado de tensões e o transporte de energia. Por esta razão é que a perda de carga e a eficiência de troca térmica são maiores em escoamentos turbulentos do que em escoamentos laminares. Estes termos são denominados de *tensões de Reynolds* $(\overline{\rho u_i' u_j'})$ e *fluxo de Reynolds* $(\overline{\rho u_i' T'})$. A modelagem de turbulência é o processo pelo qual estes termos são aproximados, de modo a promover o fechamento do sistema de equações.

3.2.2. MODELOS DE TURBULÊNCIA

ZHAI *et al* (2007) avaliaram o desempenho dos modelos de turbulência mais usuais na simulação do escoamento do ar em ambientes internos. Pesquisando em estudos existentes, os autores observam que os modelos de viscosidade turbulenta (*eddy viscosity models*) são os mais comumente adotados, sendo o k-ε, de LAUNDER et SPALDING (1974), e suas variantes, os mais populares. DAVIDSON et SCHÄLIN

(2001) consideram que, para problemas de ventilação, é geralmente suficiente o uso de modelos de turbulência mais simples, como os modelos de viscosidade turbulenta. Estes autores também mencionam que os modelos $k-\epsilon$ e $k-\omega$ (WILCOX, 1988) são amplamente utilizados. Em seu artigo de revisão bibliográfica, ZHAI *et al* (2007) citam alguns estudos nos quais os modelos de viscosidade turbulenta demonstraram um desempenho satisfatório. Estes estudos incluem a simulação do escoamento do ar em uma sala limpa (ROUAUD *et* HAVET, 2002) e em uma sala de cirurgia (KAMEEL *et* KHALIL, 2003). Ambos estudos verificaram que os modelos $k-\epsilon$ e RNG $k-\epsilon$ (YAKHOT *et* ORZSAG, 1986) apresentaram desempenho superior na previsão do campo de escoamento do ar. A maioria dos estudos citados por ZHAI *et al* (2007) verificou que o modelo RNG $k-\epsilon$ produziu resultados consistentes para esta classe de problemas. Esses autores também mencionam alguns estudos que indicam que o modelo SST $k-\omega$ (MENTER, 1994) apresenta um desempenho global compatível. Em um segundo artigo desses autores, ZHANG *et al* (2007) estudaram o desempenho de 8 modelos de turbulência prevalecentes, na simulação de 4 *benchmarks* relacionados ao escoamento do ar em ambientes internos. Uma de suas conclusões foi que, dentre os modelos de viscosidade turbulenta, os modelos RNG $k-\epsilon$ e $v2f-dav$ (DAVIDSON *et al*, 2003), apresentaram o melhor desempenho, e são recomendados para simulações do escoamento do ar em ambientes internos. A ASHRAE (2009) desenvolveu um *benchmark* para validação do escoamento do ar em regime transicional em ambientes internos. CHEN *et* WANG (2009) estudaram o desempenho de 8 modelos de turbulência prevalecentes, na simulação deste *benchmark*. Eles também concluíram que, dentre os modelos de viscosidade turbulenta, os modelos RNG $k-\epsilon$ e $v2f-dav$ apresentaram o melhor desempenho. Os estudos de ZHANG *et al* (2007) e de CHEN *et* WANG (2009) também avaliaram o desempenho de modelos mais complexos, como RSM (*Reynolds Stress Model*), DES (*Detached Eddy Simulation*) e LES (*Large Eddy Simulation*). Estes modelos apresentaram desempenho superior aos de viscosidade turbulenta, mas a um alto custo computacional. Para as análises desta tese, os modelos de viscosidade turbulenta foram adotados, dado seu bom desempenho em estudos similares.

a) Modelos de Viscosidade Turbulenta

Nestes modelos, as tensões de Reynolds são modeladas pela hipótese de Boussinesq:

$$-\overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'} = -\overline{u'_i u'_j} = \nu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} k_T \delta_{ij} . \quad (3.26)$$

Os fluxos de Reynolds são modelados usando-se a analogia de Reynolds, por:

$$-\overline{\mathbf{u}' T'} = (\nu_t / Pr_t) \nabla T . \quad (3.27)$$

Dado que o transporte turbulento de quantidade de movimento e de calor se dá pelo mesmo mecanismo de mistura turbulenta, a analogia de Reynolds estabelece uma relação entre a difusividade de quantidade de movimento e de calor para o escoamento turbulento, através do número de Prandtl turbulento.

Substituindo as equações das tensões e fluxos de Reynolds nas equações governantes (3.14,3.15), estas são modificadas para a seguinte forma:

- a) Formulação RANS para Equação da Conservação de Quantidade de Movimento, com hipótese da viscosidade turbulenta:

$$\partial \mathbf{U} / \partial t + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + (\nu + \nu_t) \nabla^2 \mathbf{U} + \bar{S}_{M,\rho} . \quad (3.28)$$

- b) Formulação RANS para Equação da Conservação da Energia (interna), com hipótese da viscosidade turbulenta:

$$\partial \bar{T} / \partial t + \mathbf{U} \cdot \nabla \bar{T} = (\alpha + \frac{\nu_t}{Pr_t}) \nabla^2 \bar{T} . \quad (3.29)$$

O modelo de turbulência associado promove uma aproximação para a viscosidade turbulenta ν_t , de modo que as equações acima, em conjunto com a equação da continuidade (3.13), condições de contorno e iniciais possam ser resolvidas. Uma das limitações dos modelos de viscosidade turbulenta está relacionada à modelagem isotrópica da turbulência, imposta pela aproximação de Boussinesq. Esta limitação pode prejudicar a simulação de escoamentos com campos de deformação complexos, ou com significativas forças de corpo, que possam afetar a turbulência de maneira considerável (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). Os modelos são classificados em função

do número extra de equações de transporte envolvidas. Os modelos a seguir descritos são de 2 equações. Existem, entretanto, modelos mais simples, como *Zero-equation*, que não demanda nenhuma equação de transporte extra.

b) Modelo κ-ε de Turbulência

Nesta modelagem, proposta por de LAUNDER *et* SPALDING (1974), a viscosidade turbulenta é calculada pela equação (3.30):

$$\nu_t = C_\mu \left(k_T^2 / \varepsilon_T \right) . \quad (3.30)$$

Duas equações de transporte extra são resolvidas, uma para o cálculo da produção de energia k_T e outra para dissipação ε_T de energia turbulenta em cada ponto:

$$\rho \frac{\partial k_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla k_T = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{eff} / \sigma_k \right) \nabla k_T \right] + P_K + G_B - \rho \varepsilon_T . \quad (3.31)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla \varepsilon_T = \nabla \cdot \left[\left(\mu_{eff} / \sigma_\varepsilon \right) \nabla \varepsilon_T \right] + \frac{\varepsilon_T}{k_T} (C_{\varepsilon 1} P_K - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon_T) . \quad (3.32)$$

Onde o termo de produção P_K é dado por:

$$P_K = 2\mu_t S_{ij} S_{ij} . \quad (3.33)$$

E a produção de turbulência pelo empuxo térmico G_B é dada por:

$$G_B = \beta g_i \left(\mu_t / \rho r_t \right) \partial T / \partial x_i . \quad (3.34)$$

Estas equações contém cinco constantes, determinadas experimentalmente (LAUNDER *et* SPALDING, 1974), e incluídas na tabela a seguir:

Tabela 3.1 Constantes associadas ao modelo κε de turbulência

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0,09	1,00	1,30	1,44	1,92

Uma das maiores limitações deste modelo está relacionada ao termo dissipativo, que é proporcional ao inverso da energia cinética turbulenta k_T (Equação 3.22). Regiões do escoamento de baixo número de Reynolds local, no qual a energia turbulenta apresenta valores muito pequenos, promovem uma situação em que este termo assume valores muito elevados, o que pode causar problemas de instabilidade da solução. Por esta razão, a validade deste modelo é restrita a escoamentos em regime totalmente turbulento. Em função disto, a região laminar da camada sub-viscosa, no escoamento junto às paredes, não é modelada, e sua conexão à região totalmente turbulenta é computada por meio de funções de parede (*wall functions*). Estas funções são baseadas no perfil do escoamento cisalhante adjacente a uma parede (lei da parede). Se y é a coordenada normal à parede, a velocidade média em $y^+ = \rho y u_\tau / \mu$, para $30 < y^+ < 500$ satisfaz a relação “log-law”:

$$u^+ = (1/\kappa) \ln(y^+) + B . \quad (3.35)$$

Onde:

$$u^+ = u/u_\tau . \quad (3.36)$$

E a velocidade de fricção u_τ é definida por:

$$u_\tau = (\tau_w/\rho)^{0,5} . \quad (3.37)$$

O uso das funções de parede, oriundas destas correlações, permite relacionar a velocidade de fricção a velocidade média, energia cinética turbulenta e dissipação turbulenta na camada “log-law”. Dada a analogia de Reynolds entre o transporte de quantidade de movimento e energia, o perfil de temperatura junto à parede pode ser obtido por meio de funções de parede específicas, derivadas destas correlações.

Alguns modelos derivados do $\kappa\epsilon$ padrão foram desenvolvidos, para minimizar estas limitações, e permitir a integração das equações até a parede. A modificação básica consiste na aplicação de funções de amortecimento aos termos de dissipação e de viscosidade turbulenta, como nos modelos LRN- $\kappa\epsilon$ (*Low Reynolds Number $\kappa\epsilon$*) de LAUNDER *et* SHARMA (1974) e de LAM *et* BREMHORST (1981). As funções de amortecimento reduzem a viscosidade turbulenta nas regiões do escoamento com baixo

número de Reynolds local, correspondentes às áreas de estagnação ou relaminarização, com baixa velocidade (NIELSEN, 1998).

c) Modelo RNG κ-ε de Turbulência

Esta modelagem, proposta por YAKHOT *et* ORZSAG (1986), é baseada em análises de renormalização de grupo das equações de Navier Stokes, e também envolve duas equações de transporte, uma para o cálculo da produção k_T e outra para taxa de dissipação ε_T de turbulência em cada ponto, tal como no modelo κ-ε padrão. As equações são similares à (3.20) a (3.22), mas as constantes utilizadas são diferentes. As equações para produção k_T e dissipação ε_T de turbulência se tornam:

$$\rho \frac{\partial k_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla k_T = \nabla \cdot [\alpha_k \mu_{eff} \nabla k_T] + P_K + G_B - \rho \varepsilon_T \quad (3.38)$$

$$\rho \frac{\partial \varepsilon_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \nabla \varepsilon_T = \nabla \cdot [\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \nabla \varepsilon_T] + \frac{\varepsilon_T}{k_T} (C_{\varepsilon 1 RNG} P_K - C_{\varepsilon 2 RNG} \rho \varepsilon) - R_\varepsilon. \quad (3.39)$$

Os fatores α_k e α_ε , que podem ser visualizados como o inverso do número de Prandtl efetivo, são calculados por:

$$\left| \frac{\alpha - 1,3929}{1 - 1,3929} \right|^{0,6321} \left| \frac{\alpha + 2,3929}{1 + 2,3929} \right|^{0,3679} = \frac{\mu}{\mu_{eff}}. \quad (3.40)$$

No limite de valores elevados de número de Reynolds (Re), em que $\mu \ll \mu_{eff}$, os fatores tendem ao limite $\alpha_k = \alpha_\varepsilon = 1,39$.

A principal diferença do modelo RNG κ-ε para o κ-ε padrão está no termo adicional R_ε , presente na equação de dissipação de turbulência, calculado por:

$$R_\varepsilon = \left[C_\mu \eta^3 \rho \left(1 - \frac{\eta}{4,38} \right) / (1 + \beta_{RNG} \eta^3) \right] \left(\varepsilon_T^2 / k_T \right) \quad (3.41)$$

$$\eta = \left(P_K / \mu_t \right)^{1/2} \left(k_T / \varepsilon_T \right). \quad (3.42)$$

Estas equações contêm quatro constantes, obtidas da teoria de renormalização de grupo (LOOMANS, 1998), e incluídas na tabela a seguir:

Tabela 3.2 Constantes associadas ao modelo RNG- $\kappa\epsilon$ de turbulência

C_μ	β_{RNG}	$C_{\epsilon 1RNG}$	$C_{\epsilon 2RNG}$
0,0845	0,012	1,42	1,68

O termo adicional R_ϵ reduz o efeito do termo de destruição de turbulência, reduzindo, portanto, a produção de energia cinética turbulenta. O menor valor da constante $C_{\epsilon 2RNG}$ também atua nesta redução. Estas características promovem uma redução do valor calculado da viscosidade turbulenta em escoamentos cisalhantes com maior taxa de deformação. Esta propriedade é superestimada pelo modelo $\kappa\epsilon$ padrão (LOOMANS, 1998). Esta característica confere ao modelo RNG $\kappa\epsilon$ uma maior capacidade de acomodar a anisotropia em regiões de separação (MEMARZADEH, 1996). Estas propriedades, e a possibilidade de extensão do modelo a problemas de escoamento com baixo número de Reynolds favorecem sua aplicação em simulações do escoamento do ar em ambientes internos (LOOMANS, 1998).

d) Modelo $\kappa\omega$ de Turbulência

Nesta modelagem, proposta por WILCOX (1988), a escala de comprimento característico da turbulência é dada por:

$$l_t = \left(k_T^{1/2} / \omega_T \right), \quad (3.43)$$

onde ω_T é a frequência turbulenta, dada por:

$$\omega_t = \epsilon_T / k_T, \quad (3.44)$$

e neste modelo, a viscosidade turbulenta é calculada por:

$$\nu_t = \rho k_T / \omega_T. \quad (3.45)$$

Esta modelagem também envolve duas equações de transporte, uma para o cálculo da produção de energia cinética turbulenta k_T e outra para sua dissipação ω_T . As equações para produção e dissipação de turbulência se tornam:

$$\rho \frac{\partial k_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla k_T = \nabla \cdot [(\mu + \mu^{\text{eff}}/\sigma_k) \nabla k_T] + P_K + G_B - \rho \beta^* k_T \omega_T \quad (3.46)$$

$$\rho \frac{\partial \omega_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \nabla \omega_T = \nabla \cdot [(\mu + \mu^{\text{eff}}/\sigma_\omega) \nabla \omega_T] + \left(\gamma_1 \omega_T / k_T \right) P_K - \beta_1 \rho \omega_T^2 \quad (3.47)$$

Estas equações contêm cinco constantes, incluídas na tabela a seguir:

Tabela 3.3 Constantes associadas ao modelo κ - ω de turbulência

σ_k	σ_ω	γ_1	β_1	β^*
2,0	2,0	0,553	0,075	0,09

Este modelo atraiu atenção inicialmente porque a integração até a parede não demanda a aplicação de funções de amortecimento (VERSTEEG *et MALALASEKERA*, 2007). A modelagem da frequência turbulenta na corrente livre (longe da região de influência das paredes) se apresenta como sua maior limitação, e o desempenho do modelo é fortemente influenciado por esta modelagem (VERSTEEG *et MALALASEKERA*, 2007).

e) Modelo SST κ - ω de Turbulência

Esta modelagem, proposta por MENTER (1994), se propõe a utilizar um modelo híbrido, que opere como o κ - ω na região junto à parede, e que se transforme no κ - ϵ padrão na região totalmente turbulenta, longe da parede. Esta estratégia procura maximizar os pontos fortes dos modelos precedentes, usando-os nas regiões em que apresentam melhor desempenho.

Esta modelagem também envolve duas equações de transporte, uma para o cálculo da produção de energia cinética turbulenta k_T e outra para sua dissipação ω_T . As equações para produção e dissipação de turbulência se tornam:

$$\rho \frac{\partial k_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \cdot \nabla k_T = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \mu^{\text{eff}} / \sigma_k \right) \nabla k_T \right] + P_K + G_B - \rho \beta^* k_T \varpi_T \quad (3.48)$$

$$\rho \frac{\partial \varpi_T}{\partial t} + \rho \mathbf{U} \nabla \varpi_T = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \mu^{\text{eff}} / \sigma_{\varpi,1} \right) \nabla \varpi_T \right] + \left(\gamma_2 \varpi_T / k_T \right) P_K - \beta_2 \rho \varpi_T^2 + (1 - F_1) S_{\varpi} \quad (3.49)$$

Onde o termo de difusão cruzada é dado por:

$$S_{\varpi} = 2 \left(\rho / \sigma_{\varpi,2} \right) \left(\partial k_T / \partial x_k \right) \left(\partial \varpi_T / \partial x_k \right) \quad (3.50)$$

Estas equações contêm seis constantes, incluídas na tabela a seguir:

Tabela 3.4 Constantes associadas ao modelo SST κ - ω de turbulência

σ_k	$\sigma_{\varpi,1}$	$\sigma_{\varpi,2}$	γ_2	β_2	β^*
1,0	2,0	1,17	0,44	0,083	0,09

F_1 é a função de mistura, que transforma o modelo em κ - ω , junto à parede ($F=1$), e κ - ϵ , na região totalmente turbulenta ($F=0$). A transição é feita de modo gradual, em função do número de Reynolds local. Simulações do escoamento externo em aerofólios demonstraram desempenho superior para casos de escoamento com camada limite com gradiente adverso de pressão (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007).

3.2.3. MODELAGEM NUMÉRICA

Não existe solução analítica para o sistema acoplado de equações diferenciais parciais que governam o escoamento do ar em um ambiente interno (LOOMANS, 1998; ASHRAE, 2013b). O uso de um método numérico torna-se então necessário à previsão das variáveis de campo do escoamento. A transformação do domínio contínuo em um espaço discretizado torna-se, portanto, necessária. Um dos métodos mais comuns envolve a técnica de Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD, *computational fluid dynamics*), baseado no método dos volumes finitos. Neste método, o domínio é dividido

em um conjunto de pequenos volumes de controle (células), definidos por uma malha. As variáveis de campo ficam armazenadas em pontos discretos, definidos nos centros de cada célula (nós). O método lineariza o sistema de equações governantes para transformá-lo em um sistema de equações algébricas. As equações governantes, apresentadas nas seções anteriores, podem ser expressas na forma geral de uma equação de transporte convectivo e difusivo para uma variável ϕ , conforme a equação a seguir:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \phi - \Gamma_{\phi} \nabla \phi) = S_{\phi} . \quad (3.51)$$

Estas equações são integradas no tempo e em cada um dos volumes de controle envolvidos (células). Os fluxos convectivos resultantes, nas faces de cada volume de controle, demandam a definição de um valor para a variável transportada nestas faces. Como estas variáveis só estão definidas nos nós, a técnica de interpolação é utilizada para esta definição. Após interpolação dos termos convectivos e difusivos, obtém-se uma equação algébrica, para cada célula P, representando o transporte da variável de campo ϕ , para o tempo considerado ($t_0 + \Delta t$), conforme a equação a seguir:

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + a_p^0 \phi_p^0 + b , \quad (3.52)$$

onde ϕ_p é o valor da variável de campo no ponto analisado (P), ϕ_{nb} o valor desta variável nos pontos vizinhos, e a_p e a_{nb} são seus coeficientes. Estes coeficientes são constituídos pela contribuição dos fluxos difusivos e convectivos. O termo b está relacionado aos termos fonte. ϕ_p^0 é o valor da variável de campo no ponto analisado (P), no passo de tempo anterior (t_0) e a_p^0 é seu coeficiente. Esta equação estabelece que o valor da variável de campo em cada ponto é o resultado das contribuições dos fluxos convectivos e difusivos, advindos de pontos vizinhos, além das contribuições dos termos fonte e da contribuição de seu valor no passo de tempo anterior, que também é modelado como um termo fonte. Esta equação está formulada no esquema implícito de discretização, que minimiza os problemas de instabilidade numérica. Dada uma condição inicial (ϕ_p^0), e um passo de tempo (Δt), a formulação de uma equação deste tipo para cada ponto da malha, com n elementos, produz um sistema linear de n equações e n incógnitas, que pode ser transformado de modo a ser solucionado por um método numérico, como o algoritmo de Thomas (TDMA- *tri-diagonal matrix*

algorithm, THOMAS, 1949), amplamente utilizado em códigos CFD (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007).

Como os fluxos, presentes nos coeficientes, são determinados pelos campos de velocidade e pressão, que fazem parte da solução, um processo iterativo é implantado, para a obtenção do valor de ϕ_p dentro de cada passo de tempo. Partindo de um valor estimativo inicial, as equações são resolvidas, e entre cada iteração, as variáveis são corrigidas por um algoritmo específico. No algoritmo SIMPLE (*semi-implicit method for pressure-linked equations*, PATANKAR *et* SPALDING, 1972), o algoritmo usa uma forma simplificada da equação de correção de velocidades na equação da continuidade para a correção de pressões. O processo é repetido até que os critérios de convergência sejam alcançados, para cada passo de tempo. Estes critérios podem envolver os erros residuais de cada equação e o balanço global de conservação de massa e energia. Os erros residuais envolvidos na equação de transporte de cada variável ϕ são definidos, em cada iteração, por:

$$R\phi = \frac{\sum_{\text{cells } P} [\sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p]}{\sum_{\text{cells } P} |a_p \phi_p|} \quad (3.53)$$

Após a convergência, o passo de tempo é atualizado, e os valores calculados são usados como valor de ϕ_p^0 no novo passo de tempo, e o processo é repetido até o último passo de tempo considerado na simulação.

As aproximações envolvidas no método produzem inacurácia da solução, mesmo para um problema bem posto. Esta inacurácia pode estar associada aos erros e incertezas.

Os erros são definidos como uma deficiência do método que é causada por fatores que não estejam associados à falta de conhecimento, como o erro de arredondamento (*round-off*), erro de iteração (residual) ou erro de discretização (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). O erro de arredondamento está relacionado com a representação computacional de um número real por um número finito de algarismos significativos. Este erro é causado pela capacidade computacional limitada, e pode ser minimizado com o uso de uma maior unidade de arredondamento de máquina (*machine accuracy*), como a de precisão dupla (*double precision*). Este erro

também pode ser causado pelo “cancelamento catastrófico”, que ocorre em uma operação de subtração entre dois números de valores elevados, cuja diferença seja menor do que unidade de arredondamento de máquina. Para se evitar esta situação, é prática comum em CFD representar a pressão pelo seu valor manométrico, e não absoluto. Os erros residuais de iteração foram definidos na equação (3.43), e na prática, as limitações de capacidade e tempo computacional determinam que o processo iterativo seja truncado quando este erro assume um valor suficientemente pequeno. Os erros de discretização estão associados aos termos de ordem superior que são omitidos na aproximação das derivadas parciais usando-se séries de Taylor. O uso de esquemas de interpolação de ordem superior e o refinamento da malha são utilizados como estratégia para a redução deste erro (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). O teste de refinamento de malha, que compara os resultados obtidos em malhas de diferentes tamanhos, é realizado até que o refinamento não produza variação considerável nos resultados, o que caracteriza uma solução independente de malha. Em um processo de verificação, estes erros são quantificados. O índice de convergência de malha (GCI, *grid convergence index*), usando a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK *et al* (1993), é adotado para estimativa do erro numérico dos erros de discretização.

As incertezas são definidas como uma deficiência do método causada por fatores que estejam associados à falta de conhecimento, como incertezas sobre os dados de entrada e incertezas relacionadas ao modelo físico (VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). As incertezas sobre os dados de entrada estão relacionadas às diferenças entre o domínio modelado e o real, incertezas sobre as reais condições de contorno do problema e diferenças relativas às propriedades do fluido. As incertezas relacionadas ao modelo físico ocorrem pela extrapolação da validade dos sub-modelos associados (turbulência, transferência de calor e massa, etc.) ou pelo limite de acurácia destes sub-modelos. Estes sub-modelos, embora envolvam o melhor conhecimento científico aplicado sobre os processos físicos, contêm, geralmente, constantes que são ajustadas a partir de medições experimentais de alta qualidade, mas que foram conduzidas em condições particulares, geralmente associadas à uma classe de escoamentos mais simples. A aplicação destes modelos a escoamentos complexos extrapola estas condições particulares e a validade de sua aplicação. A validação para uma determinada classe de problemas, pela comparação dos resultados numéricos com

dados oriundos de experimentos de alta qualidade, tem por objetivo avaliar as incertezas envolvidas (VERSTEEG *et al.* MALALASEKERA, 2007). Este processo demanda medições experimentais que contenham documentação completa da geometria do problema, das condições de contorno, da acurácia e precisão dos instrumentos, da metodologia envolvida e dos resultados medidos.

3.2.4. ANÁLISE DO ESCOAMENTO DO AR EM UM AMBIENTE INTERNO

A ASHRAE (2013a) define o sistema de condicionamento de ar como um conjunto de equipamentos destinados ao tratamento do ar, de forma a controlar simultaneamente sua temperatura, umidade, pureza e distribuição no ambiente. Os sistemas mais usados em aplicações voltadas ao controle de infecção (laboratoriais e hospitalares) são do tipo “todo-ar” (*all-air systems*), com vazão constante de ar (CAV, *constant air volume*; DELUGA, 1997; ASHRAE, 2013a). Este sistema provê o fornecimento de uma vazão de ar relativamente constante ao ambiente, com propriedades compatíveis ao controle das condições internas (ASHRAE, 2013a). Todos os processos envolvidos, como resfriamento, desumidificação e filtração são realizados em uma unidade de tratamento de ar, localizada fora do ambiente beneficiado (HOWELL *et al.*, 2005). De modo a criar um ambiente adequado, os parâmetros de distribuição do ar interno, como velocidade, temperatura, turbulência e concentração de contaminantes, devem ser adequadamente controlados (WANG *et al.* CHEN, 2009). Entretanto, o controle destes parâmetros em ambientes internos pode ser consideravelmente complexo (WANG *et al.* CHEN, 2009), já que o escoamento do ar nestes ambientes exibe praticamente todos os fenômenos simples e complexos associados ao escoamento incompressível, como vórtices, separação e religamento, escoamentos secundários, instabilidades, transição e turbulência (JIANG *et al.*, 2009).

Os modos de ventilação dos ambientes podem ser classificados como ventilação por mistura (MV, *mixed ventilation*), por deslocamento (DV, *displacement ventilation*), unidirecional (UD, *unidirectional*) e pelo piso (UFAD, *underfloor air distribution*; ASHRAE, 2001a). Para a aplicação laboratorial, as recomendações técnicas do NIH (2016) mencionam o uso das estratégias de ventilação por mistura (MV) e unidirecional (UD), mas não incluem o uso do modo pelo piso (UFAD). MEMARZADEH (2009)

menciona que a estratégia de MV é a mais comumente adotada em laboratórios. A ASHRAE (2013a) menciona que as estratégias de MV e UD compreendem os modos de ventilação mais comuns em aplicações voltadas ao controle de infecção. No modo de ventilação por mistura, o ar tratado é insuflado no ambiente numa velocidade muito maior do que a aceitável para a zona de ocupação (ASHRAE, 2001a). Ocorre a mistura do jato de ar insuflado com o ar ambiente, pela indução, o que promove a equalização da temperatura e a redução da velocidade. A zona ocupada é ventilada diretamente pelo jato residual, a baixa velocidade, ou pelo escoamento reverso por ele induzido (ASHRAE, 2001a). Este modo promove uma distribuição relativamente uniforme de temperatura, umidade e concentração de contaminantes na zona ocupada (ASHRAE, 2001a). No modo de ventilação por deslocamento (DV), o ar é insuflado diretamente na zona ocupada, a baixa velocidade, sendo então transportado para a zona próxima ao teto pela convecção natural promovida pelas fontes de calor do ambiente (ASHRAE, 2001a). Estas fontes tendem a promover o movimento ascendente do ar, por meio de plumas térmicas convectivas, que promovem o transporte de calor e de contaminantes para fora da zona ocupada (ASHRAE, 2001a). Diferentemente do modo MV, o modo DV promove a estratificação vertical de temperatura e de contaminantes, e minimiza a mistura do ar (ASHRAE, 2001a). O modo unidirecional (UD) promove a distribuição de ar de modo a prover um escoamento relativamente unidirecional, no sentido do teto para a zona ocupada (ASHRAE, 2001a). Este modo é geralmente adotado na ventilação de salas limpas controladas (ASHRAE, 2001a). A figura a seguir ilustra o arranjo geral destes modos.

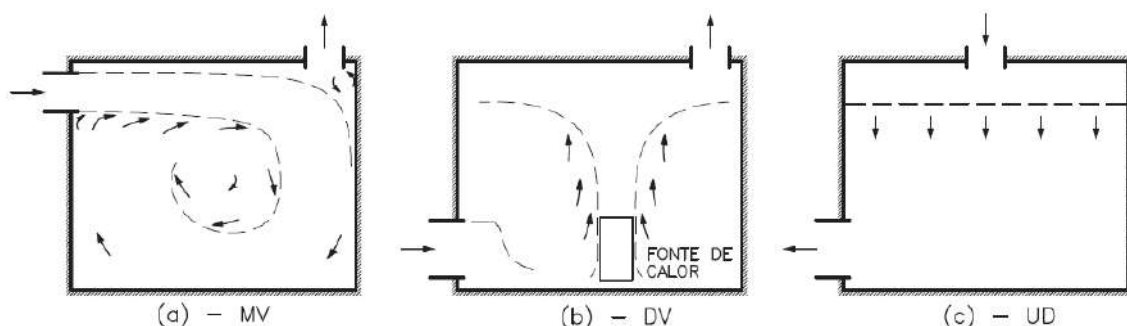


Figura 3.1 Modos de Ventilação. (a) MV – *mixed ventilation*. (b) DV – *displacement ventilation*. (c) UD – *Unidirectional ventilation*

O escoamento em uma sala ventilada pelo modo MV é tipicamente governado pelo fluxo de quantidade de movimento linear através das aberturas de insuflação, e é descrito, para o caso de regime permanente, por equações elípticas (NIELSEN, 1998). É possível identificar uma área próxima à abertura de insuflação na qual o escoamento pode ser caracterizado como um jato (plano, radial ou tridimensional), descrito por equações parabólicas (NIELSEN, 1998), e classificado no regime turbulento (ASHRAE, 2001a). A ordem de grandeza do número de Reynolds (Re) do jato de ar, para as aplicações práticas de ventilação de recintos internos, está entre 10^4 e 10^5 (para $O(10^0 \text{ m/s}) \leq u_{outlet} \leq O(10^1 \text{ m/s}), l_{outlet} = O(10^{-1} \text{ m})$), de modo que se verifica a classificação do mesmo no regime turbulento. A produção de turbulência do jato está associada à forte componente de tensão cisalhante, causada pelo gradiente de velocidade. Na teoria da decomposição de Reynolds, a variação da energia cinética turbulenta (κ_t), necessária a produzir as flutuações de velocidade (u'_i), características do escoamento turbulento, é retirada do campo de velocidades médias, pela variação do trabalho realizado pelos gradientes deste campo contra as tensões de Reynolds ($\overline{\rho u'_i u'_j} S_{ij}$, adotando-se a aproximação de Boussinesq). Imagens produzidas por técnicas de visualização de escoamento demonstram que o escoamento cisalhante gerado pelo jato apresenta uma fronteira errática que define uma zona de alta intensidade turbulenta (KUNDU *et al*, 2012). Localmente, a movimentação desta fronteira é governada pela movimentação dos vórtices turbulentos do interior da região turbulenta. Tipicamente, esta movimentação induz o transporte de fluido para o jato, a partir de regiões adjacentes (*entrainment*), o que promove o aumento da sua seção transversal na medida em que o mesmo se desenvolve. Esta indução produz o transporte de partículas de fluido com menor quantidade de movimento linear para o interior da zona do jato, o que promove um efeito global de desacelerá-lo, na medida em que o mesmo se desenvolve. O mesmo fenômeno de transporte promove a diluição das propriedades escalares do jato inicial (KUNDU *et al*, 2012). Medidas do ângulo de espalhamento da seção transversal demonstram valores entre 20° e 24° , para jatos livres em ambientes de grandes dimensões (ASHRAE, 2001a). Caso o jato seja não-isotérmico, o seu desenvolvimento é modificado por ações de convecção associadas à diferença de massa específica (ASHRAE, 2001a). A zona de desenvolvimento e expansão do jato de ar pode ser

subdividida em 4 sub-zonas (ASHRAE, 2001a): A 1ª, compreendendo um comprimento de aproximadamente $4 l_{outlet}$ (dimensão característica do dispositivo de insuflação), na qual a velocidade do jato é máxima e praticamente invariável; A 2ª, uma zona de transição, cujo comprimento depende do tipo de dispositivo de insuflação, sua razão de aspecto dimensional e a intensidade turbulenta inicial; A 3ª, na qual a velocidade é reduzida para valores compatíveis com a zona ocupada, com comprimento entre $25 l_{outlet}$ a $100 l_{outlet}$ e a 4ª, de degradação do jato, aonde a velocidade decresce abruptamente. A interação do jato de insuflação com as superfícies sólidas do ambiente (paredes, piso e teto) também promove a produção de turbulência (ASHRAE, 2001a). A característica tridimensional da geometria agrega complexidade às análises, dado que a característica não-linear das equações governantes não permite que o efeito isolado de cada superfície seja analisado individualmente e posteriormente superposto ao efeito das demais para compor uma análise global. Pode-se, entretanto, promover análises baseadas na teoria do escoamento turbulento paralelo a uma placa plana, realizando-se simplificações e aproximações que só se tornam válidas para poucas regiões das superfícies envolvidas. Nesta teoria, a presença da parede, disposta paralelamente à direção do escoamento, promove o desenvolvimento de uma camada limite, que separa duas regiões: A região interna, afetada pela presença da parede, e a região externa, dominada pelos efeitos inerciais. A região interna é subdividida em 03 camadas. A subcamada viscosa ($y^+ < 5$), na qual os efeitos viscosos são dominantes, a camada de amortecimento, na qual os efeitos viscosos e turbulentos são da mesma magnitude, e camada “log-law” ($y^+ > 50$), na qual as tensões turbulentas dominam (SCHLICHTING, 1979). A condição de não-escorregamento promove um elevado gradiente de velocidade média na região próxima à parede ($y/\delta \leq 0,2$), induzindo uma alta taxa de produção de turbulência. A análise da distribuição de variáveis turbulentas nesta região demonstra que a turbulência é consideravelmente anisotrópica próxima à parede, já que o processo produz maior magnitude de flutuações na direção paralela à parede (POPE, 2000; VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). O valor das propriedades turbulentas decrescem com o aumento da distância à parede. A R.M.S. (*root mean square*, raiz quadrática média) das flutuações das três componentes de velocidade tornam-se

praticamente iguais a partir de uma distância, $y/\delta > 0,8$, indicando que a estrutura da turbulência se torna menos anisotrópica longe da parede (POPE, 2000; VERSTEEG *et MALALASEKERA*, 2007). A energia cinética turbulenta produzida pela interação do jato de ar com o ar da zona ocupada e com as superfícies das paredes, piso e teto é transportada para outras regiões do escoamento e dissipada (ASHRAE, 2001a). A energia cinética é transferida dos vórtices de maior para menor escala, no que é denominado de cascata de energia. Esta transferência ocorre até alcançar as micro-escalas de Kolmogorov, para as quais os efeitos viscosos são relativamente importantes, suficientes para promover a conversão de energia cinética em energia térmica interna. Esta conversão é realizada através do trabalho realizado pelos vórtices de menor escala contra as tensões viscosas.

O escoamento do ar em ambientes internos reais ventilados pelo modo MV apresenta outras características que tornam sua análise consideravelmente mais complexa do que as simplificações acima mencionadas. A disposição de todas as superfícies sólidas pode afetar todo o domínio do escoamento, que passa a ser totalmente rotacional. A adoção de um jato fraco pode prover partes do domínio com escoamento turbulento, e outras partes com regime transicional e laminar. A mobília interna pode gerar separações do escoamento.

No escoamento em uma sala ventilada pelo modo DV, o fluxo de insuflação é provido com baixa quantidade de movimento linear através das aberturas na zona de ocupação (MUI *et al*, 2009), com velocidades menores do que 0,5 m/s (ASHRAE, 2001a). Em contraste com o modo MV, a ventilação por DV tem por objetivo minimizar a mistura na zona ocupada (ASHRAE, 2001a). O ar de insuflação é distribuído na zona ocupada, e é transportado para as cotas mais elevadas do recinto pelas plumas térmicas geradas pelas fontes de calor (ASHRAE, 2001a). Um nível de estratificação vertical é gerado quando a vazão mássica de insuflação é compatível com a das plumas térmicas (ASHRAE, 2001a). Duas zonas distintas são então formadas no interior do ambiente: Uma zona abaixo do nível de estratificação, sem recirculação de ar; uma zona acima deste nível, com recirculação de ar (ASHRAE, 2001a). Em um sistema adequadamente dimensionado, a zona de estratificação está acima da zona ocupada, e a eficiência de ventilação da zona é maximizada (ASHRAE, 2001a).

O fluxo de entrada de ar pelos dispositivos de insuflação se dá geralmente através de jatos turbulentos (ASHRAE, 2001a), mesmo nas salas com modo de ventilação DV e UD (NIELSEN, 1998). Nestes casos, entretanto, o dispositivo de insuflação apresenta características que promovem o desenvolvimento de um jato formado pela coalescência de múltiplos jatos paralelos, com menores escalas de dimensão. Este arranjo promove um jato resultante com menor intensidade turbulenta do que no caso das salas ventiladas pelo modo MV. A baixa turbulência reduz a taxa de transporte de partículas de fluido para a zona do jato. Estas características também reduzem a taxa de produção de turbulência nas superfícies sólidas de paredes, teto e piso, e promovem um escoamento transicional na maioria do domínio.

4. DINÂMICA DO TRANSPORTE DE AERODISPERSÓIDES EM AMBIENTES INTERNOS

4.1. CARACTERIZAÇÃO DOS AERODISPERSÓIDES

Os aerodispersóides são caracterizados pela suspensão de matéria particulada no ar (FRIEDLANDER, 2000). Esta matéria é oriunda da conversão da fase gasosa em partículas ou pela desintegração de líquidos ou sólidos (FRIEDLANDER, 2000). Os vários termos adotados para descrever os sistemas particulados refletem sua ubiquidade e a impressão que causam na humanidade desde os tempos mais remotos: Poeira (*dust*) é o termo geralmente empregado para descrição de aerodispersóides provenientes da desintegração do solo (FRIEDLANDER, 2000). Fumaça (*smoke*) e fumo (*fume*) são os termos geralmente empregados na descrição de aerodispersóides formados pela conversão de partículas a partir da fase gasosa, sendo portanto, muito menores (da ordem de 1 μm , FRIEDLANDER, 2000). Névoa (*mist*) é o termo geralmente empregado para descrição de aerodispersóides provenientes da desintegração de líquidos (FRIEDLANDER, 2000). Fuligem (*soot*) se refere normalmente aos aerodispersóides compostos por pequenas partículas de carbono, oriundas do processo de combustão.

As propriedades de maior interesse na caracterização dos aerodispersóides são a dimensão característica das partículas, a concentração e a composição química (FRIEDLANDER, 2000). Carga elétrica, estrutura cristalina e propriedades óticas são importantes em algumas aplicações (FRIEDLANDER, 2000).

A dimensão das partículas é caracterizada pelo seu diâmetro, salvo exceções. Para gotículas líquidas esféricas, objeto de estudo desta tese, o diâmetro (d_p) é a medida inequívoca adotada (FRIEDLANDER, 2000). Para partículas com geometria complexa, um diâmetro equivalente é frequentemente adotado. O diâmetro aerodinâmico, é um dos mais comumente utilizados, e é definido como o diâmetro de uma esfera com a mesma velocidade terminal da partícula de interesse (FRIEDLANDER, 2000). Como a dinâmica associada a aglomerados é diferente da de partículas esféricas, o diâmetro de mobilidade é geralmente adotado nestes casos. A mobilidade é a relação entre velocidade do aglomerado e a força produtora deste movimento. O diâmetro de mobilidade é o diâmetro de uma esfera que possui a mesma mobilidade do aglomerado estudado (FRIEDLANDER, 2000). A dinâmica do transporte de aerodispersóides é extremamente relacionada ao diâmetro característico (NAZAROFF, 2004). Os diâmetros de interesse variam entre 0,1 μm a 100 μm (ASHRAE, 2001b). Aerodispersóides com diâmetro acima de 10 μm apresentam rápida deposição gravitacional, na ausência de vento. Partículas com diâmetro menor que 1 μm permanecem em suspensão por tempo indeterminado (ASHRAE, 2001b).

Uma caracterização pertinente à saúde humana é a capacidade de penetração das partículas aerotransportáveis nas vias respiratórias, em função do diâmetro equivalente. Partículas com diâmetro médio até a ordem de 10 μm são denominadas torácicas, e apresentam capacidade de penetração nas vias aéreas inferiores. Aquelas com diâmetro da ordem igual e inferior a 1 μm são denominadas respiráveis, pois têm capacidade de penetração nas áreas de troca gasosa (alvéolos pulmonares) (TIAN *et al*, 2002), com potencial de grave agravo à saúde.

Tradicionalmente, há uma subdivisão entre partículas finas e grossas, separadas pela ordem de diâmetros de 1 μm (FRIEDLANDER, 2000; ASHRAE, 2001b). Estas se diferenciam também no mecanismo de origem. As partículas finas são geradas por mecanismos de condensação de vapores ou combustão, enquanto que as grossas são geradas por atividades mecânicas como a erosão e a construção.

A composição química dos aerodispersóides é de grande preocupação toxicológica, sendo refletida nos limites de segurança ocupacional, normas de emissão

de poluentes e normas de qualidade do ambiente interno (IEQ, *indoor environmental quality*).

A concentração de aerodispersóides é definida de várias formas, dependendo da aplicação. A concentração numérica (*number concentration*, número de partículas por unidade de volume de gás) é geralmente adotada na caracterização de salas limpas. A concentração mássica (*mass concentration*) é adotada na caracterização dos limites de poluição atmosférica e de segurança ocupacional (FRIEDLANDER, 2000). Para a maioria dos casos de interesse prático, a concentração de aerodispersóides não modifica a viscosidade do gás associado (FRIEDLANDER, 2000).

Em algumas aplicações, como na poluição atmosférica, os aerodispersóides apresentam partículas com diferentes dimensões, sendo caracterizados como polidispersos. A caracterização deste sistema é feita pela função de distribuição de tamanho. Existem modelos que podem ser aplicados para ajustar dados experimentais de aerodispersóides, de modo a caracterização desta função, como a distribuição Normal e Power-law. Os momentos das funções de distribuição, definidos pela equação (4.1), produzem informações específicas sobre a caracterização dos aerodispersóides envolvidos.

$$M_v(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty n_d(d_p, \mathbf{r}, t) d_p^v d(d_p) , \quad (4.1)$$

onde n_d é o número de partículas de diâmetro d_p , na posição \mathbf{r} e tempo t . v é a ordem do momento associado à função de distribuição. O momento de ordem zero produz informação sobre a concentração total de aerodispersóides em um dado ponto e tempo. O primeiro momento, quando dividido pelo de ordem zero, produz informação sobre o diâmetro médio das partículas envolvidas. O segundo momento é proporcional à área total dos aerodispersóides, que pode ser útil em análises de degradação visual causada em altas concentrações (poluição atmosférica). O terceiro momento é proporcional ao volume total das partículas, e pode ser utilizado para conversão da concentração numérica em mássica. O quarto momento é proporcional à área total projetada do material que sedimenta de um gás estacionário. O quinto momento é proporcional à taxa de sedimentação de partículas.

4.2. DINÂMICA DO TRANSPORTE DE AERODISPERSÓIDES

A dinâmica de aerodispersóides depende da interação entre a partícula e as moléculas do gás. Esta interação, por sua vez, depende da razão entre o diâmetro característico das partículas (d_p) e do trajeto livre médio das moléculas de gás (l_o), caracterizada pelo número de Knudsen ($Kn = 2l_o/d_p$). Quando $Kn \gg 1$, esta dinâmica demanda a aplicação da teoria cinética dos gases. Por outro lado, quando $Kn \ll 1$, o efeito macroscópico da ação das moléculas de gás é traduzido por uma força de arraste, e o gás é modelado como um meio contínuo. Para este último caso, o balanço de forças sobre uma partícula que se move em um fluido produz a seguinte equação:

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_{p,d} + \mathbf{F}_{p,b} + \mathbf{F}_{p,VM} + \mathbf{F}_{p,P} + \mathbf{F}_{p,T} + \mathbf{F}_{p,E}, \quad (4.2)$$

onde:

$\mathbf{F}_{p,d}$ é a força de arraste produzida pelo fluido, em função da velocidade relativa;

$\mathbf{F}_{p,b}$ é a força de empuxo, produzida pela gravidade, em função da diferença de massa específica entre partícula e fluido;

$\mathbf{F}_{p,VM}$ é a força de “massa virtual”, que está relacionada à aceleração da massa virtual de fluido que é deslocado pela movimentação da partícula.

$\mathbf{F}_{p,P}$ é a força do gradiente de pressões, produzida pela variação da pressão, em volta da partícula, pela aceleração do fluido;

$\mathbf{F}_{p,T}$ é a força de termoforese, produzida pelo gradiente de temperatura do fluido;

$\mathbf{F}_{p,E}$ é a força de campo elétrico, produzida pelo carregamento elétrico de partículas, submetidas a um diferencial de potencial elétrico;

Para efeitos de análise desta tese, voltada aos ambientes internos de laboratórios, as partículas não apresentam carga elétrica suficientemente diferente das demais superfícies envolvidas, de modo a desprezar a ação de forças de campo elétrico ($\mathbf{F}_{p,E} = 0$). A diferença de temperaturas é suficientemente baixa, de modo a desprezar a ação de termoforese ($\mathbf{F}_{p,T} = 0$). A força de massa virtual e de gradiente de pressões são dadas pelas equações a seguir:

$$\mathbf{F}_{p,VM} = C_{p,d,V} \left(\rho / \rho_p \right) \left(\mathbf{u}_p \cdot \nabla \mathbf{u} - d\mathbf{u}_p/dt \right), \quad (4.3)$$

onde ρ é a massa específica do ar, ρ_p a massa específica da partícula e $C_{p,d,V}$ é o fator de massa virtual, uma constante.

$$\mathbf{F}_{p,P} = \left(\rho / \rho_p \right) \left(\mathbf{u}_p \cdot \nabla \mathbf{u} \right). \quad (4.4)$$

A formulação da equação anterior (4.4) promove uma aproximação entre o gradiente de pressões e de velocidades (termos difusivos e termos-fonte desprezados).

Para os aerodispersóides envolvidos, produzidos a partir de gotículas, com massa específica muito maior do que a do ar, os termos relativos ao gradiente de pressões e à força de massa virtual também podem ser desprezados ($\mathbf{F}_{p,P} = 0$; $\mathbf{F}_{p,VM} = 0$).

O termo da força de arraste pode ser modelado pela equação (4.5):

$$\mathbf{F}_{p,d} = \left(C_{d,p} Re_p / 24 \right) (3\pi\mu d_p) (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p). \quad (4.5)$$

Esta expressão define o coeficiente de arraste da partícula, $C_{d,p}$, que pela análise dimensional, é função do número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula e velocidade relativa entre gás e partícula, Re_p :

$$Re_p \equiv \left(\rho d_p / \mu \right) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_p|. \quad (4.6)$$

Quando $Re_p \ll 1$, a Lei de Stokes é aplicável, $C_{d,p} = 24/Re_p$, e a equação se torna a força de arraste de Stokes. FRIEDELANDER (2000) apresenta uma forma da equações (4.3 e 4.5) para a aceleração de uma partícula, em movimento linear (unidirecional), com baixo valor de Re_p , através de um fluido em repouso:

$$\mathbf{F}_{p,d} = -3\pi\mu d_p \mathbf{u}_p - \frac{1}{12}\pi d_p^3 \left(d\mathbf{u}_p/dt \right) - \frac{3}{2}\pi\rho d_p^2 \left(\frac{\nu}{\pi} \right)^{0,5} \int_{-\infty}^t \left(d\mathbf{u}_p/dt' \right) \frac{dt'}{(t-t')^{0,5}}. \quad (4.7)$$

Embora esta correlação apresente validade apenas para o caso do movimento unidirecional, ela é geralmente adotada na prática, desprezando-se os termos de ordem

superior, e mantendo-se apenas o termo do arraste de Stokes (FRIEDELANDER, 2000). FRIEDELANDER (2000) promove uma análise do impacto desta simplificação, obtendo uma solução analítica para cada um dos casos, e promovendo a comparação dos resultados. Substituindo a equação (4.7) em (4.2), e reescrevendo esta última equação na forma adimensional, a mesma se torna (FRIEDELANDER, 2000):

$$\left(2\gamma + 1/9\right)\left(dV_p/d\theta\right) = 1 - V_p - \frac{1}{\pi^{0,5}} \int_0^\tau \left(dV_p/d\theta'\right) \frac{d\theta'}{(\theta - \theta')^{0,5}} , \quad (4.8)$$

onde:

$$V_p = u_p/u_{p,t} , \text{ e } u_{p,t} \text{ é a velocidade terminal da partícula} \quad (4.9)$$

$$\gamma = \rho_p/\rho \quad (4.10)$$

$$\theta = 4tv/d_p^2 \quad (4.11)$$

FRIEDLANDER (2000) compara a solução desta equação, com condições iniciais $V_p = 0$, em $t = 0$, com a solução do problema simplificado, no qual a força de arraste é representada apenas pelo termo de Stokes:

$$m_p \frac{du_p}{dt} = -3\pi\mu d_p u_p + m_p g . \quad (4.12)$$

Partículas que obedecem a esta relação linear entre força de arraste e velocidade são denominadas *stokesianas*. A solução desta equação (4.12), com a condição inicial $V_p = 0$, em $t = 0$, é dada por:

$$V_p = 1 - \exp\left[-18\mu t / \rho_p d_p^2\right] . \quad (4.13)$$

FRIEDLANDER (2000) menciona que, para $\gamma = 10^3$, a diferença de (4.13) para a solução exata de (4.8) é muito pequena para $u_p < 0,9u_{p,t}$, mas que aumenta na medida que a partícula se aproxima de sua velocidade terminal. Isto significa que o tempo real de relaxação será um pouco maior do que aquele calculado de forma

simplificada, adotando-se apenas o termo de Stokes (FRIEDLANDER, 2000). O tempo de relaxação de uma partícula pode ser estimado pela equação (4.13), e é dado por:

$$\tau_p = \rho_p d_p^2 / 18\mu \quad . \quad (4.14)$$

Observa-se que, para a aerodispersão de partículas micrométricas, a escala de tempo de relaxação é da ordem de nano a micro segundos.

A distância de parada é a distância finita que uma partícula percorre, ao ser lançada em um escoamento, com velocidade inicial u_0 , até o equilíbrio com o escoamento. Pode ser estimada pela integração da equação (4.13), e é dada por:

$$s_p = \rho_p d_p^2 u_0 / 18\mu \quad . \quad (4.15)$$

Observa-se que, para a aerodispersão de partículas micrométricas, esta distância é muito menor do que 1 diâmetro, para uma velocidade inicial até 10 m.s^{-1} .

O número de Stokes (Stk) é calculado pela razão entre a distância de parada, dada pela equação (4.15), e uma dimensão característica do escoamento, l :

$$Stk = \rho_p d_p^2 u_0 / 18\mu l \quad . \quad (4.16)$$

A velocidade terminal de uma partícula, $u_{p,t}$, movimentada pela ação da força do campo gravitacional, em equilíbrio com a força de arraste, pode ser estimada, para baixo valor de Re_p , pela equação (4.12), com $du_p/dt = 0$:

$$u_{p,t} = \left(\rho_p g d_p^2 / 18\mu \right) C_{p,p} \left(1 - \rho / \rho_p \right) \quad . \quad (4.17)$$

Onde o termo ρ / ρ_p pode ser geralmente desprezado, e $C_{p,p}$ é um fator de correção de fricção, em função do tamanho da partícula. Este fator permite a aplicação do termo de arraste às partículas com diâmetro que produza Kn na faixa de transição entre o regime contínuo e molecular ($l_o \approx 0,065\mu\text{m}$, para ar a 25°C). Este fator de correção é determinado a partir de uma interpolação, baseada nos experimentos realizados por Millikan, e posteriormente por Davies (FRIEDLANDER, 2000). A

tabela a seguir apresenta uma estimativa dos valores da velocidade terminal de assentamento gravitacional para partículas esféricas *stokesianas*, para as ordens dos diâmetros de interesse no transporte de aerodispersóides ($\rho_p = 1,0 \times 10^3 \text{ kg.m}^{-3}$, $\mu = 1,84 \times 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.s^{-1}$).

Tabela 4.1 Estimativa da velocidade terminal de assentamento gravitacional de partículas stokesianas para as ordens de diâmetros de interesse no transporte de aerodispersóides

d_p [μm]	$u_{p,t}$ [m.s^{-1}]
0,01	$6,6 \times 10^{-8}$
0,1	$8,5 \times 10^{-7}$
1	$3,5 \times 10^{-5}$
10	$3,0 \times 10^{-3}$
100	$3,0 \times 10^{-1}$

A análise dos dados da tabela 4.1 permite verificar que a velocidade de deposição de partículas, pela ação gravitacional, é suficientemente pequena, para partículas até $10\mu\text{m}$, o que permite que estas classes de partículas permaneçam em suspensão por um período de tempo elevado.

4.3. PROCESSOS DE TRANSPORTE DE AERODISPERSÓIDES EM UM AMBIENTE INTERNO

As propriedades físicas (dimensão das partículas, concentração, etc.) e químicas dos aerodispersóides são modificadas, em função do tempo e do espaço, pelos processos de transporte. Estes envolvem basicamente a difusão e convecção das partículas, causadas pelos gradientes de concentração, escoamento do gás e ação de um campo de força externo. Fenômenos como a coalescência de partículas, a condensação e a

nucleação modificam o diâmetro equivalente das partículas, e podem influenciar no transporte global associado a um determinado processo. A ação destes processos pode vir a promover a interceptação de algumas partículas por superfícies, de modo que as mesmas deixam a suspensão.

4.3.1. EQUAÇÕES DE TRANSPORTE CONVECTIVO DIFUSIVO

A taxa de variação da concentração de partículas em um ponto, submetidas ao transporte convectivo produzido pelo escoamento e pela ação gravitacional, e difusivo pelo gradiente de concentrações, é expressa pela seguinte equação:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_p n) = \nabla \cdot (D_b \nabla n) + \dot{n} , \quad (4.18)$$

onde n é a concentração numérica de partículas, D_b é o coeficiente de difusão browniano das partículas e \dot{n} é a taxa de geração de partículas. Considerando que a advecção de partículas é causada pela ação convectiva do escoamento e pela ação gravitacional, $\mathbf{u}_p = \mathbf{u} + \mathbf{s}$, onde \mathbf{u} é a velocidade do escoamento, e \mathbf{s} é a componente da velocidade produzida pela ação gravitacional. A equação (4.16) se torna:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} n) = \nabla \cdot (D_b \nabla n) - \nabla \cdot (\mathbf{s} n) + \dot{n} . \quad (4.19)$$

Usando-se a decomposição de Reynolds:

$$\mathbf{u} = \mathbf{U} + \mathbf{u}' , \quad (4.20)$$

$$n = \bar{n} + n' , \quad (4.21)$$

e tomando-se a média temporal da equação de transporte (4.19), a mesma pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \bar{n}) = \nabla \cdot (D_b \nabla \bar{n}) - \nabla \cdot (\overline{\mathbf{u}' n'}) - \nabla \cdot (\mathbf{s} \bar{n}) + \bar{\dot{n}} . \quad (4.22)$$

Adotando-se a analogia de Reynolds e o modelo de viscosidade turbulenta, os fluxos de Reynolds são modelados por:

$$-\overline{\mathbf{u}' n'} = (v_t / Sc_t) \nabla \bar{n} , \quad (4.23)$$

onde o número de Schmidt turbulento, $Sc_t = \nu_t/D_t$, expressa a razão entre a difusividade turbulenta de quantidade de movimento e de massa. A equação de transporte (4.22), passa a ser escrita na forma:

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\bar{n}) = \nabla \cdot [(D_b + \nu_t/Sc_t)\nabla \bar{n}] - \nabla \cdot (\mathbf{s}\bar{n}) + \bar{n} \quad (4.24)$$

Para o caso particular do escoamento incompressível, com propriedades constantes:

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \bar{n} = (D_b + \nu_t/Sc_t)\nabla^2 \bar{n} - \nabla \cdot (\mathbf{s}\bar{n}) + \bar{n} \quad (4.25)$$

4.3.2. ANÁLISE DOS FENÔMENOS DE TRANSPORTE ENVOLVIDOS NA AERODISPERSÃO DE PARTÍCULAS

Uma análise da magnitude relativa de cada componente pode ser realizada adimensionalizando-se as variáveis envolvidas no transporte convectivo difusivo das partículas aerodispersóides em um problema genérico, isotérmico, de modo que a equação 4.25 se torna:

$$\frac{\partial n^*}{\partial t} + \mathbf{U}^* \cdot \nabla^* n^* = \left(\frac{1}{Pe} + \frac{1}{Re \cdot Sc_t} \right) \nabla^{*2} n^* - Stk \cdot \vartheta \nabla^* \cdot (\mathbf{s}^* n^*) + \dot{n}^*, \quad (4.26)$$

onde:

$$n^* = n/n_o, \quad n_o \text{ é a concentração numérica média máxima de aerodispersóides} \quad (4.27)$$

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U}/U_o, \quad \text{e } U_o \text{ é uma velocidade característica do escoamento do ar} \quad (4.28)$$

$$\nabla^* = l \nabla, \quad \text{e } l \text{ é uma dimensão característica do problema} \quad (4.29)$$

$$t^* = t U_o / l \quad (4.30)$$

$$\mathbf{s}^* = \mathbf{s}/u_{p,t}, \quad \text{e } u_{p,t} \text{ é a velocidade terminal da partícula.} \quad (4.31)$$

O transporte de aerodispersóides submetidos a convecção e difusão, em escoamento isotérmico, na ausência de campos elétricos, é governado basicamente por quatro grupos adimensionais:

- a) Péclet ($Pe = U_o l / D_b$), que é a razão entre a taxa de transporte advectivo pelo escoamento e a taxa de difusão browniana (molecular) produzida pelo gradiente de concentrações;
- b) Schmidt turbulento ($Sc_t = \nu_t / D_t$), que é a razão entre a taxa de difusividade de quantidade de movimento e de massa, causada pelas flutuações turbulentas;
- c) Reynolds ($Re = U_o l / \nu_t$), que é a razão entre os efeitos inercias e viscosos no escoamento;
- d) Um grupo formado pela velocidade de assentamento gravitacional adimensional, que pode ser expresso em função do número de Stokes da partícula ($u_{p,t}^* = u_{p,t} / U_o = \vartheta \cdot Stk$, onde $\vartheta = gl \cdot U_o^{-2}$);

O transporte de aerodispersóides pelo mecanismo gravitacional, função do número de Stokes, é proporcional à d_p^2 . Este termo só passa a ser governante para as partículas grossas, com $O(d_p) \geq 10 \mu m$ (NAZAROFF, 2004). O mecanismo de transporte puramente difusivo, inversamente proporcional ao número de Péclet, só se torna relevante para casos em que a advecção causada pelo escoamento não é expressiva, como em regiões de estagnação, ou no caso envolvendo o transporte de partículas ultrafinas, com $O(d_p) \leq 0,1 \mu m$ (NAZAROFF, 2004). A ação das flutuações turbulentas do escoamento pode ser visualizada como um aparente aumento do mecanismo de difusão de aerodispersóides, através do número de Schmidt turbulento. O termo de advecção pela ação do escoamento é governado pelo sistema de ventilação da sala, e promove o transporte em duas escalas: na escala local, há o transporte de partículas de uma região do domínio para outra (sem alteração na quantidade total de partículas na sala); na escala global, há a diluição da concentração de partículas pela renovação de ar interno por ar externo e filtrado (com menor concentração). O sistema de ventilação também governa o mecanismo de transporte difusivo turbulento de partículas.

4.3.3. DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS AERODISPERSÓIDES

As partículas que forem transportadas para uma região de fronteira, junto às superfícies, podem vir a ser depositadas, e deixarem a suspensão. As forças de *London-*

Van der Waals, atrativas por natureza, tornam-se importantes quando a distância entre as partículas e a superfície é muito pequena ($< d_p$, FRIEDLANDER, 2000). Caso a energia de atração, associada a estas forças, seja superior à energia cinética da partícula, a mesma adere à superfície. Forma-se, portanto, uma camada limite de concentração de partículas, junto às superfícies. O gradiente de concentrações gerado maximiza o mecanismo de deposição das partículas ultrafinas, governadas pela difusão molecular (FRIEDLANDER, 2000; NAZAROFF, 2004). A deposição das partículas maiores ocorre por conta de mecanismos gravitacionais e inerciais (FRIEDLANDER, 2000; NAZAROFF, 2004). Em um caso genérico, nas regiões próximas às superfícies, as velocidades normal e tangencial do escoamento do ar tendem à zero, em função das condições de não-eskorregamento e de impenetrabilidade. As partículas maiores, entretanto, podem ser incapazes de seguir a mesma trajetória do gás, devido à sua inércia, e uma força de arraste se forma, em função do movimento relativo entre gás e partícula. A deposição pode vir a ocorrer caso a força de arraste não consiga modificar a trajetória da partícula a tempo de evitar a colisão. Análises teóricas desenvolvidas para escoamentos com baixos números de Reynolds (Re), envolvendo partículas *stokesianas*, demonstram que a eficiência de deposição inercial depende do número de Stokes ($Stk = \rho_p d_p^2 u_0 / 18 \mu l$). Estas análises adotam a aproximação de que a força de arraste possa ser expressa como uma função linear entre a velocidade do ar e a da partícula (o que a caracteriza como *stokesiana*).

O número de Stokes (Stk) relaciona duas escalas de comprimento características: a *distância de parada* da partícula e alguma escala de comprimento do escoamento (L). A distância de parada pode ser interpretada como aquela que é percorrida por uma partícula, do instante inicial em que é liberada no fluido, com velocidade inicial (u_0), até um tempo suficientemente grande, para o qual a partícula possua uma velocidade terminal constante ou esteja em repouso em relação ao fluido. As análises teóricas de escoamento ao redor de cilindros e esferas demonstram que a deposição inercial de partículas na superfície, oriundas da corrente livre à montante, só ocorre a partir de um determinado valor crítico do número de Stokes (Stk_{crit}). Para escoamentos com Stk abaixo deste valor crítico, a partícula acompanha a trajetória do fluido, e não é interceptada e depositada. Entretanto, para a maioria dos escoamentos reais, a

aproximação de linearidade entre as velocidades não é válida, mas cálculos numéricos e estudos experimentais indicam que a eficiência de deposição é finita, para $Stk \neq 0$, desaparecendo quando $Stk \rightarrow 0$ (FRIEDLANDER, 2000).

Estas aproximações também não são válidas para o escoamento turbulento, mas alguns fundamentos podem ser assimilados a partir da análise do escoamento turbulento de um aerossol paralelo a uma placa plana. Neste caso, a mistura turbulenta promove um perfil aproximadamente constante de concentrações de partículas, fora da subcamada viscosa. Eliminando-se a deposição gravitacional, a deposição inercial das partículas é causada pelas flutuações turbulentas da componente de velocidade normal à placa. Teoricamente, a eficiência de deposição das partículas originalmente presentes na camada aerodinâmica de transição depende de um grupo adimensional que relaciona duas escalas de comprimento: a distância de parada da partícula, impulsionada na subcamada viscosa ($y^+ < 5$) pelas flutuações turbulentas, e uma escala de comprimento característica da turbulência (ν/u_*). u_* é denominado *velocidade de fricção*, sendo aproximadamente igual à RMS da flutuação da componente de velocidade normal à placa. O grupo é denominado *velocidade adimensional de deposição* (κ^+), expresso conforme equação a seguir:

$$\kappa^+ = \frac{\kappa}{u_*} = F[S^+] = F\left[\frac{mu_*^2}{f\nu}\right] \quad (4.32)$$

A distância adimensional de parada, (S^+), também pode ser interpretada como um *tempo adimensional de relaxação*, (τ^+), onde m/f é um tempo característico para a movimentação da partícula e ν/u_*^2 é um tempo característico para as flutuações turbulentas. Seguindo-se a prática usual, partículas com uma distância adimensional de parada $S^+ < 5$ não conseguiriam atravessar a sub-camada laminar ($y^+ < 5$) e alcançar a parede (FRIEDLANDER, 2000). Entretanto, dados experimentais mostraram que houve deposição para casos em que $S^+ < 5$ (FRIEDLANDER, 2000). Esta deposição é explicada por dois fatores: existem partículas com velocidades superiores à RMS da flutuação de velocidade normal, e, portanto, com maiores distâncias de parada; diferentemente da teoria, a sub-camada viscosa não está totalmente estagnada. Dados

experimentais para a deposição turbulenta na faixa mostram forte correlação entre a velocidade de deposição (κ) e a velocidade média do gás fora da camada limite ($\propto U_o^4$).

Considerando-se todos os mecanismos de deposição, a difusão molecular controla a deposição das partículas menores. Com o aumento do diâmetro aerodinâmico, a eficiência deste mecanismo decai, e a eficiência da deposição inercial cresce. O resultado é uma faixa de tamanhos que provê um valor mínimo da eficiência de deposição. Esta faixa está na ordem de grandeza de diâmetros entre $0,1\mu\text{m}$ e $1\mu\text{m}$ (FRIEDLANDER, 2000).

ZHAO *et* WU (2007) analisaram a influência da intensidade turbulenta, rugosidade superficial e concentração de partículas do ar de uma sala ventilada na taxa de deposição de partículas. Os estudos foram conduzidos adotando-se dois modos de ventilação: MV e DV. Os autores verificaram que a taxa de deposição das partículas ultrafinas $O(d_p) \leq 0,1\mu\text{m}$ é sensível à intensidade turbulenta do ar próximo às superfícies. O aumento da intensidade turbulenta aumenta a velocidade de fricção, e reduz a espessura da camada limite de concentração, aumentando o gradiente de concentração. A deposição por difusão molecular, governante do transporte das partículas ultrafinas, é maximizada. O aumento da intensidade turbulenta não produz efeitos na taxa de deposição das partículas grossas, $O(d_p) > 10\mu\text{m}$, governadas pela ação gravitacional (ZHAO *et* WU, 2007). O efeito sobre as partículas do modo de acumulação, $O(d_p) = 1\mu\text{m}$, também é desprezível (ZHAO *et* WU, 2007). Os estudos também demonstraram que o aumento da rugosidade superficial só influencia no aumento da taxa de deposição das partículas finas, $O(d_p) \leq 0,1\mu\text{m}$, pelo mesmo mecanismo de maximização da difusão molecular pela redução da espessura da camada limite de concentração (ZHAO *et* WU, 2007).

Existem outros fenômenos e mecanismos de transporte que podem modificar a concentração de partículas no ambiente interno, como a termoforese e a coalescência. A termoforese é o transporte de partículas pelo gradiente de temperatura (FRIEDLANDER, 2000). ZHAO *et* WU (2007) consideram que as diferenças de temperatura nos ambientes internos (menores do que 10°C em todo o espaço interno)

promovem apenas um pequeno efeito de transporte, que pode ser desprezado se comparado com os efeitos difusivos e inerciais. A coalescência de partículas pode modificar o mecanismo de transporte governante, pelo aumento do diâmetro aerodinâmico (NAZAROFF, 2004). A coalescência é um processo de segunda ordem, enquanto que a maioria dos outros fenômenos que afetam a concentração de partículas é de primeira ordem (NAZAROFF, 2004). Assim, a significância deste fenômeno só passa a ser importante quando a concentração de partículas é alta, mas é desprezível quando esta concentração é baixa (NAZAROFF, 2004).

5. VALIDAÇÕES E SELEÇÃO DO CÓDIGO CFD

5.1. INTRODUÇÃO

Nas seções anteriores foram apresentadas as equações governantes do escoamento do ar e do transporte de contaminantes em um ambiente interno. Verificou-se que, dada a incapacidade de obtenção de solução analítica, a aplicação de métodos numéricos, como aqueles envolvendo a técnica CFD², passa a ser necessária. A validade dos resultados obtidos por estes métodos constitui-se, entretanto, numa questão de preocupação, dados os erros numéricos associados à discretização e as incertezas associadas à modelagem. Em função disto, CHEN (1997) indica a necessidade de uma validação experimental do código CFD utilizado. A AIAA (*American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 1998), define a validação como “o processo de determinar o grau de acurácia do modelo (CFD) na representação do mundo real, na perspectiva da intenção de uso do modelo”. A validação aborda a acurácia na representação de um sistema completo envolvendo o escoamento do ar, transferência de calor e transporte de contaminantes. Demonstra a habilidade do usuário e do código CFD na previsão do escoamento em aplicações representativas do ambiente interno, para os quais dados experimentais confiáveis estão disponíveis (ASHRAE, 2013b). A ideia básica da validação está na identificação de dados experimentais adequados, de modo a garantir que todos os fenômenos de importância do problema sejam corretamente modelados, e quantificar os erros e incertezas presentes na simulação (ASHRAE, 2013b). Considera-se, para efeitos desta tese, que a verificação dos sub-

² *Computational Fluid Dynamics*, Dinâmica dos Fluidos Computacional

modelos associados (turbulência, transferência de calor, transporte de contaminantes, etc.) foi previamente realizada pelo desenvolvedor do código CFD. Por este motivo, a verificação está limitada à quantificação do erro numérico associado à discretização, usando-se o método GCI, adotando-se a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK et al (1993).

5.2. IDENTIFICAÇÃO DOS CASOS DE VALIDAÇÃO

A validação deve ser realizada para um sistema completo, que inclua todos os fenômenos de escoamento interno e transferência de calor, em uma geometria com configuração completa (ASHRAE, 2013b). Dados experimentais podem ser obtidos a partir de medições em campo ou de experimentos realizados em câmaras de testes (*benchmarks*, ASHRAE, 2013b).

Três *benchmarks* foram utilizados, para a validação dos códigos CFD na simulação do transporte de contaminantes no interior de ambientes destinados ao controle de infecção. Estes *benchmarks* compreendem pesquisas confiáveis, baseadas em métodos experimentais, que produziram dados de alta qualidade do escoamento do ar e transporte de contaminantes em ambientes internos, ventilados mecanicamente.

O primeiro *benchmark* adotado foi desenvolvido pela ASHRAE (2009), através de seu projeto de pesquisa RP-1271, destinado à validação da simulação das complexas características do escoamento tridimensional do ar em ambientes internos, no regime transicional.

O segundo benchmark adotado foi desenvolvido por JIN *et al* (2012), e produziu dados da aerodispersão de contaminantes no interior de um laboratório dotado de ventilação por mistura (MV).

O terceiro benchmark adotado foi desenvolvido por YIN *et al* (2009), e produziu dados da aerodispersão de contaminantes no interior de um quarto hospitalar de isolamento de pacientes, dotado de ventilação por mistura (MV) e por deslocamento positivo (DV).

5.2.1. O BENCHMARK ASHRAE RP-1271 (2009)

O benchmark desenvolvido pela ASHRAE, através do projeto de pesquisa RP-1271 (2009), teve por objetivo produzir dados úteis à validação dos códigos CFD para a simulação do escoamento em regime transicional em ambientes internos. Os casos propostos incluem complexos padrões de escoamento, oriundos do jato de insuflação de ar, separações e plumas térmicas convectivas, e que são comumente identificados na classe de problemas do escoamento em ambientes internos.

Os experimentos foram conduzidos em uma câmara de testes, com dimensão útil de 2,4m x 2,4m x 2,4m, dotada de uma conexão de entrada e uma de saída de ar. A conexão de entrada foi dimensionada para produzir um jato de insuflação no regime transicional ($u=1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $Re = 2600$), com vazão de ar de 100 l.s^{-1} , o que produz uma taxa de movimentação de 25 ACH. A diferença de cotas de elevação entre as conexões de entrada e de saída, associada ao posicionamento das mesmas em paredes opostas, produz uma zona que é ventilada por um escoamento secundário de padrão circulatório, devido à indução causada pelo jato de insuflação de ar. Este padrão de ventilação é característico da zona de ocupação de ambientes dotados de ventilação por mistura. Estas características básicas compreendem o caso 1, que é isotérmico. No caso 2, também isotérmico, um obstáculo retangular, com dimensões de 1,22m x 1,22m x 1,22m foi incluído no centro da câmara de testes. A função deste obstáculo é de produzir a separação do escoamento e aumentar a dissipação de turbulência, de modo a representar a ação da mobília ao escoamento de ambientes reais. No caso 3, o obstáculo é aquecido, com uma dissipação fixa de 700 W, e a temperatura de insuflação é controlada em 22,2 °C. A função deste caso é a de adicionar uma nova característica ao escoamento, oriunda da presença das plumas térmicas convectivas. Os três casos foram idealizados de modo a produzir um aumento gradual de complexidade de simulação. O caso 3 produz o cenário de maior complexidade de validação, e o mais próximo do real escoamento em ambientes internos ocupados, por produzir padrões de escoamento de complexa simulação, oriundos do jato de insuflação, separações e plumas térmicas. Por esta razão, o caso 3 foi selecionado para efeitos de validação, neste trabalho. O caso 2 também foi simulado, para análise preliminar e preparo à simulação de um caso de maior complexidade com a presença do empuxo térmico. A próxima figura apresenta a

configuração geral do experimento, para os casos 2 e 3, com os planos de medições envolvidos.

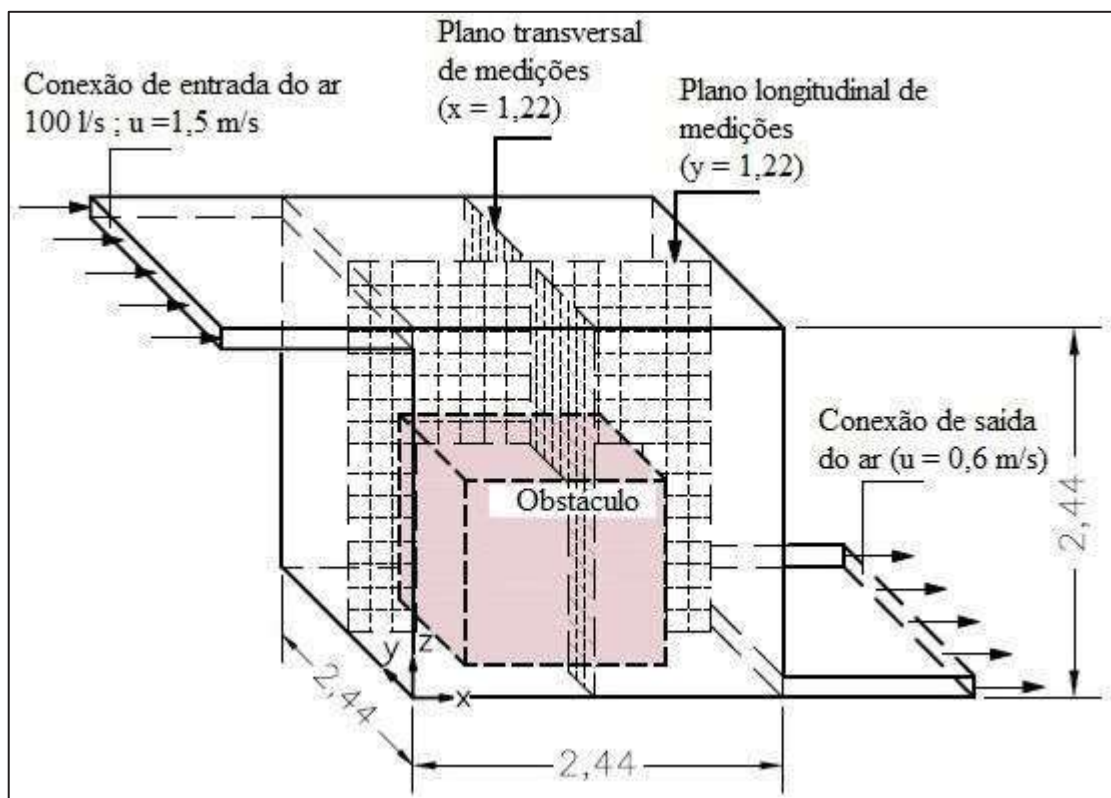


Figura 5.1 Configuração geral do caso 3 do benchmark produzido pelo ASHRAE RP-1271. Fonte: Adaptado de ASHRAE (2009)

As medições apresentadas pela ASHRAE (2009) compreendem: velocidade (módulo e componentes); energia cinética turbulenta (TKE, *turbulent kinetic energy*); intensidade turbulenta (TI); e temperatura, para cada ponto. As medições foram conduzidas em dois planos: longitudinal e transversal à direção do escoamento principal (ver figura 5.1), em pontos localizados em uma malha com espaçamento de 0,15 m. O número total de pontos envolvidos nas medições foi de 384. As medições envolvendo velocidade, TKE e TI foram realizadas através de um anemômetro de ultrassom, com precisão de $0,005 \text{ m.s}^{-1}$ (ASHRAE, 2009). A medição em cada ponto foi conduzida durante um período de 5 minutos, nos quais 6000 dados foram coletados para a produção do valor médio apresentado nos resultados. Um intervalo de 12 minutos foi observado após a relocação das sondas, para garantir o restabelecimento do escoamento

às perturbações. As medições de temperatura foram realizadas com 16 termopares, precisão 0,2 °C (ASHRAE, 2009). Estas medições foram conduzidas em um intervalo de duas horas, no qual as variações térmicas mostraram-se desprezíveis.

5.2.2. O BENCHMARK DE LABORATÓRIO

O benchmark desenvolvido por JIN *et al* (2012), produziu dados úteis à validação de simulações de CFD voltadas ao transporte de contaminantes em aplicações laboratoriais. As medições foram conduzidas em uma câmara de testes, construída em escala real, de modo a representar a configuração típica de laboratórios de pesquisa. A câmara foi dotada de obstáculos, dimensionados para simular a presença de pessoal, equipamentos e mobiliário do laboratório. A dissipação térmica dos obstáculos foi calibrada de modo a produzir o valor associado ao metabolismo humano (87 a 100 W) e à taxa de dissipação de equipamentos compatível com esta classe de laboratórios (foi utilizada uma dissipação que produz a taxa de $46 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$, por área de piso).

A vazão de ar é insuflada pelo teto através de um difusor de 4 vias, dimensão nominal 12"x12" (0,3m x 0,3m), e a conexão de exaustão poderia ser localizada em três posições: duas na parede, junto ao teto (GE-1 e GE-2), e uma como exaustão localizada sobre a bancada.

O contaminante foi modelado por SF6 (hexafluoreto de enxofre), utilizado como gás marcador (*tracer gas*), injetado de forma controlada na câmara, em uma concentração de 1%, para não alterar a massa específica do ar. O contaminante podia ser injetado em três posições diferentes, no interior do laboratório (*spill positions*). 16 casos foram medidos, variando a vazão de ar (e taxa de movimentação resultante, entre 6 e 12 ACH), posição da exaustão (GE-1, GE-2 e bancada), e localização do ponto de inserção de contaminante (*spill* 1,2 e 3).

O trabalho de JIN *et al* (2012) apresenta resultados da concentração de SF6 e da eficácia de ventilação (razão entre a concentração na exaustão e no ponto de interesse) em sete pontos distribuídos ao longo de 8 mastros de medição (*poles*). Estas medições foram realizadas através de um analisador foto-acústico, precisão de 0,001 ppm (JIN *et al*, 2012), com múltiplas sondas. Foram realizadas medições não-intrusivas, simultâneas em 12 pontos, em cada período de 15s. Estas medições foram repetidas 10 vezes para

obtenção do valor médio. Foram tomadas precauções e medições adicionais para garantia do regime permanente durante a execução dos testes (JIN *et al*, 2012).

O caso 2 deste benchmark promove um cenário do qual se poderia esperar uma eficácia de ventilação (ξ) mais próxima da premissa de mistura perfeita ($\xi = 1,0$). Neste caso, a vazão de ar envolvida produz o valor máximo da taxa de movimentação (12 ACH). O ponto de injeção de contaminante está localizado numa região central da sala, submetida ao efeito de mistura do escoamento induzido pelo jato de descarga do difusor. Entretanto, os resultados apresentados por JIN *et al* (2012) demonstram que esta premissa não se aplica. Caso aplicável, a simulação com a técnica CFD não seria necessária, na medida que os gradientes de concentração na sala apresentariam baixo valor, e uma análise de parâmetros concentrados (*lumped*) seria suficiente à previsão da concentração resultante na sala. Por esta razão, este caso foi selecionado para a validação. A próxima figura apresenta a configuração geral do caso 2, com a posição dos mastros de medição envolvidos na validação (P1, P6 e P8).

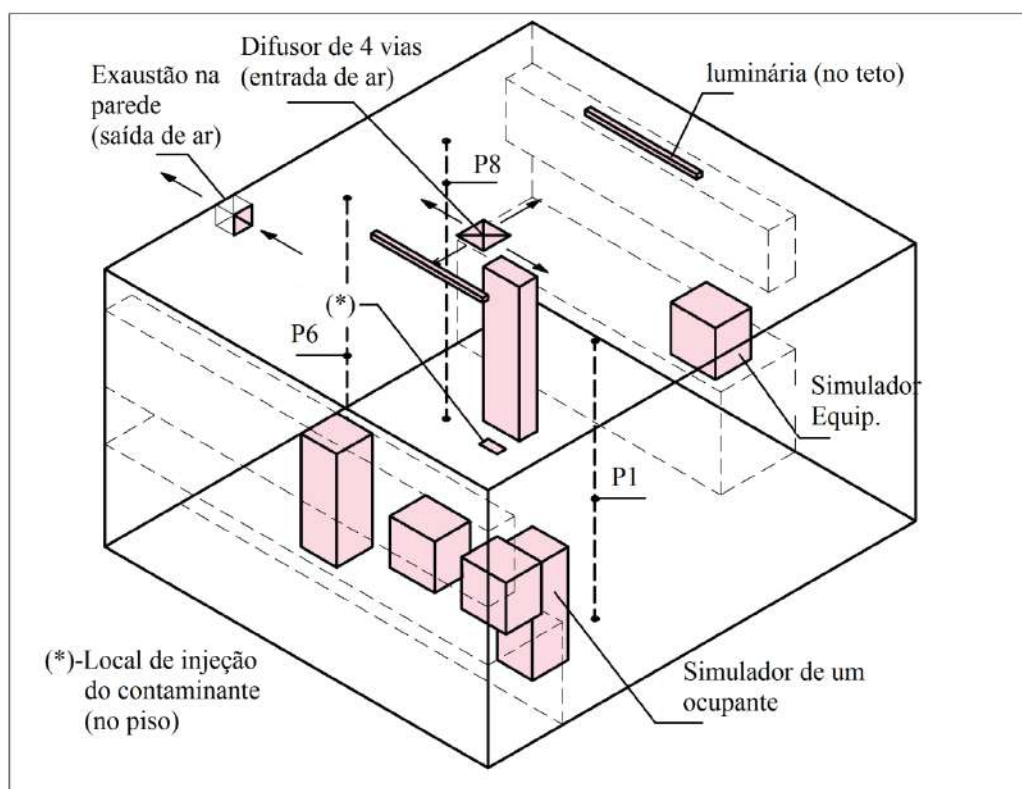


Figura 5.2 Configuração geral do caso 2 do benchmark de laboratório. Fonte: Adaptado de JIN et al (2012)

5.2.3. O BENCHMARK HOSPITALAR

O benchmark desenvolvido por YIN *et al* (2009), produziu dados úteis à validação de simulações de CFD voltadas ao transporte de contaminantes em um quarto de isolamento de pacientes com infecção aerotransportável. As medições foram conduzidas numa câmara de testes construída em escala real, com configuração planejada a representar um quarto de isolamento hospitalar. A câmara foi dotada de obstáculos planejados para simular a presença do mobiliário, equipamentos, paciente e profissionais de saúde envolvidos nesta aplicação. A dissipação de calor dos obstáculos foi calibrada de modo a simular a dissipação real de pessoas e equipamentos associados a esta aplicação hospitalar (a dissipação total envolvida é de 277 W).

O sistema de ventilação poderia ser configurado para o modo de ventilação por mistura (MV) e por deslocamento positivo (DV). O modo de ventilação por mistura se dava pelo uso de um difusor quadrado de teto, para insuflação de ar. O modo de ventilação por deslocamento positivo era estabelecido pela insuflação de ar através de um difusor de placa perfurada, localizado junto ao piso do quarto. A extração de ar se dava através de duas grelhas de exaustão, instaladas na parede, sendo uma representando a exfiltração para o banheiro do quarto.

O contaminante foi modelado por SF₆ (hexafluoreto de enxofre), utilizado como gás marcador (*tracer gas*), injetado de forma controlada na câmara, em uma concentração de 1%, para não alterar a massa específica do ar. O benchmark também apresenta casos em que o contaminante foi modelado por partículas esféricas monodispersas de 1µm e 3µm de diâmetro. Em todos os casos, o contaminante era injetado na posição da boca do paciente, que foi modelado deitado sobre a cama. 16 casos foram medidos, variando o modo de ventilação (MV e DV), a vazão de ar (e taxa de movimentação resultante, entre 4 e 6 ACH), posição da exaustão associada ao banheiro (junto ao piso e junto ao teto), e modelagem de contaminante (SF₆, partículas de 1µm e de 3µm).

O trabalho apresenta resultados de medições da distribuição de velocidade e temperatura do ar para 7 pontos em 8 mastros de medição (*poles*) distribuídos pelo quarto. Também apresenta resultados de medições da distribuição de eficácia de ventilação (razão entre a concentração na exaustão e no ponto de interesse) para 6

pontos em 5 mastros de medição (*poles*) distribuídos pelo quarto. As medições de velocidade e temperatura foram realizadas utilizando-se anemômetros do tipo omnidirecional, precisão $0,02 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ para velocidade e $0,2 \text{ }^{\circ}\text{C}$ para temperatura (YIN *et al*, 2009). A medição em cada ponto foi conduzida durante um período de 40 minutos, nos quais 24.000 dados foram coletados para a produção do valor médio apresentado nos resultados. As medições de concentração de SF6 foram realizadas através de um analisador foto-acústico, precisão de 0,001 ppm (YIN *et al*, 2009), com múltiplas sondas. As medições de concentração de partículas foram realizadas através de um espectrômetro de diâmetro aerodinâmico de partícula, faixa de $0,898 \text{ }\mu\text{m}$ a $1,114 \text{ }\mu\text{m}$, para partículas de $1 \text{ }\mu\text{m}$, e de $2,642 \text{ }\mu\text{m}$ a $3,523 \text{ }\mu\text{m}$, para partículas de $3 \text{ }\mu\text{m}$ (YIN *et al*, 2009). Foram realizadas medições não-intrusivas, simultâneas em 6 pontos, em cada período de 12s. Estas medições foram repetidas de 10 a 25 vezes para obtenção do valor médio. Foram tomadas precauções e medições adicionais para garantia do regime permanente durante a execução dos testes (YIN *et al*, 2009).

O caso 5Ha do benchmark, com ventilação por deslocamento positivo (DV) e taxa de ventilação de 4 ACH, produziu um desempenho de ventilação melhor do que casos com ventilação por mistura (MV) e maior taxa de ventilação, devido ao transporte convectivo de contaminantes, pelas plumas térmicas, para fora da zona de ocupação (junto ao teto). Os resultados de YIN *et al* (2009) convergem ao conceito de que a estratégia de DV pode ser aplicada para melhorar a qualidade do ambiente interno, reduzir o risco de exposição dos profissionais de saúde, e ainda reduzir o consumo energético da edificação. Por estas razões, a validação de um modelo numérico que possibilite a adequada simulação do desempenho desta estratégia de ventilação é fundamental para futuras pesquisas e para auxílio aos projetos destes ambientes. Este desempenho não pode ser modelado usando-se a premissa de mistura perfeita ($\xi = 1.0$), já que a estratificação de temperatura é a maior fonte do empuxo térmico, responsável pelo eficaz transporte de contaminantes para fora da zona ocupada. Por estes motivos, este caso foi selecionado para validação. As próximas figuras apresentam a configuração geral do caso 5Ha, com a posição dos mastros de medição envolvidos na validação (P1, P2, P3, P4, P5, P6, P7 e P8 – velocidade e temperatura; TG1, TG 2, TG3, e TG5 - contaminante).

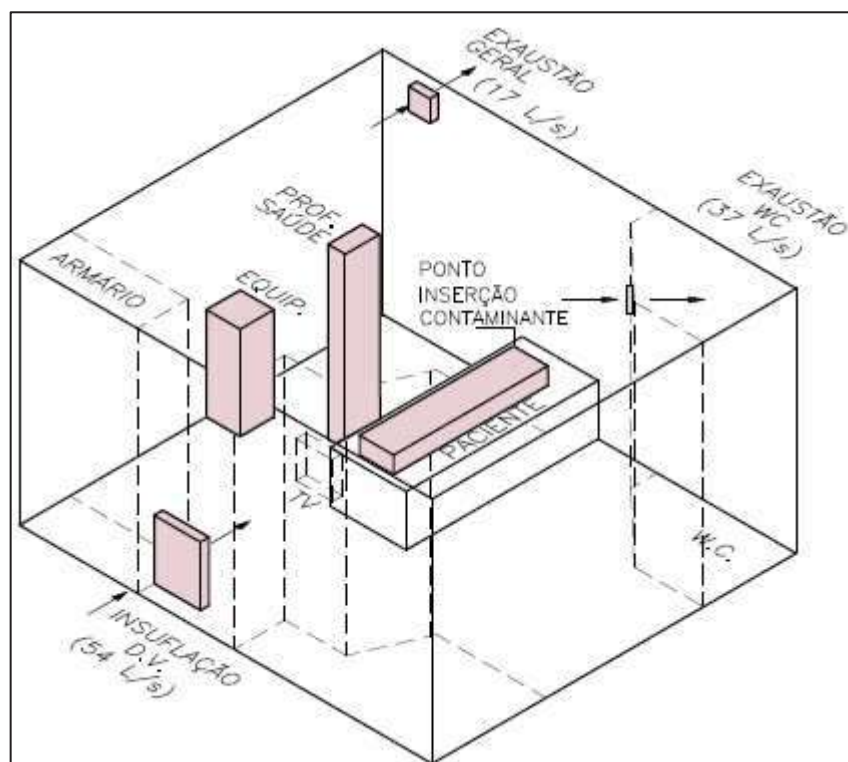


Figura 5.3 Configuração geral do caso 5Ha do benchmark hospitalar. Fonte: Adaptado de YIN et al (2009)

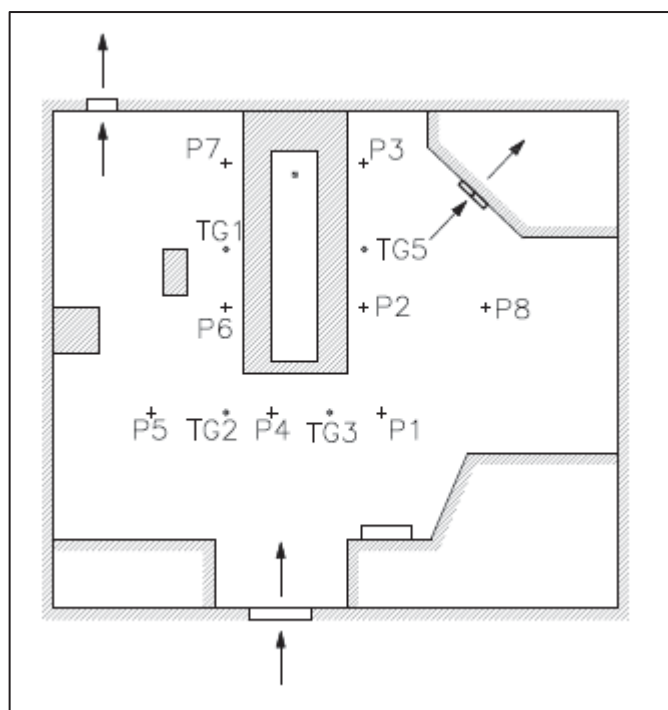


Figura 5.4 Planta-baixa do benchmark hospitalar, com a posição dos mastros de medições de velocidade, temperatura e contaminantes. Fonte: Adaptado de YIN et al (2009)

5.3. IDENTIFICAÇÃO DOS CÓDIGOS CFD

Três códigos CFD foram pré-selecionados para uso nesta pesquisa. Os critérios de seleção envolveram a disponibilidade e o uso em simulações similares. Os códigos pré-selecionados foram constituídos por dois softwares comerciais, CFX (ANSYS, 2012a) e FLUENT (ANSYS, 2012b), em sua versão 14.5, e um software livre, desenvolvido pelo NIST (*National Institute of Standard and Technology*), CONTAM/CFD-0 (WANG *et al*, 2007a), em sua versão 3.1.

O CFX e o FLUENT encontram-se disponíveis no laboratório aonde esta pesquisa foi desenvolvida (LTTC/COPPE – Laboratório de Transmissão e Tecnologia de Calor). O CFX foi utilizado (em uma versão simplificada) no trabalho de GILL-LOPEZ *et al* (2013) voltado à aplicação laboratorial. O FLUENT foi utilizado no projeto de pesquisa RP-1458 da ASHRAE (CHEN *et al*, 2014), sobre o processo de transporte de contaminantes entre ocupantes de ambientes internos. Também foi utilizado por WANG *et al* (2009) para análise do desempenho de modelos de turbulência ao benchmark da ASHRAE (2009).

O CONTAM/CFD-0 é um software voltado a aplicações de transporte de contaminantes em ambientes internos. Foi desenvolvido por WANG *et al* (2007a), acoplando-se dois programas distintos: O CONTAM, desenvolvido por WALTON *et al* (2013) para o NIST, e o código CFD-0, desenvolvido por SREBRIC *et al* (1999). O CONTAM é um software para cálculo do transporte convectivo de contaminantes entre diversas zonas interligadas (multizonas). Permite a modelagem de elementos de transporte como ventiladores, dutos e frestas entre ambientes. Também permite a modelagem de elementos de remoção de contaminantes, como filtros de ar e lâmpadas germicidas ultra-violeta (UVGI, *ultraviolet germicidal irradiation*). O transporte pelas frestas é computado em função da infiltração ou exfiltração causada pela diferença de pressurização entre zonas. A limitação deste software está na premissa de mistura perfeita em cada zona. Para minimizar esta limitação, WANG *et al* (2007a) promoveram o acoplamento deste software ao código CFD-0, de SREBRIC *et al* (1999), de modo a permitir que uma zona de interesse do modelo possa ser simulada usando-se a técnica de CFD. O código CONTAM/CFD-0 já foi utilizado em alguns estudos voltados a aplicação de transporte de contaminantes em ambientes internos (WANG *et al*

CHEN, 2007b, 2008), e é livremente disponibilizado pelo NIST. Este programa foi adotado pela ASHRAE e NFPA (*National Fire Protection Association*, KLOTE *et al*, 2012) como uma ferramenta padrão nas análises relacionadas à pressurização como ferramenta de controle de fumaça em edificações. Sua versão atual, 3.2, permite a integração com o software ENERGY PLUS.

5.4. METODOLOGIA DE AVALIAÇÃO

A metodologia para validação segue aquela definida pela ASHRAE (2009), através da graduação da acurácia do modelo em quatro categorias: A (bom, grau 4), B (aceitável, grau 3), C (marginalmente aceitável, grau 2), e D (inaceitável, grau 1). Esta metodologia propõe que o grau seja atribuído em função da diferença relativa entre simulação e experimento, para cada ponto analisado. Diferenças menores do que 10% são atribuídas com grau 4. Valores entre 10% e 29% são atribuídos com grau 3. Valores entre 30% e 50% são atribuídos com grau 2, e valores maiores do que 50% são atribuídos com grau 1. Para as previsões de velocidade, uma penalização reduz o grau em 1 ponto, caso a direção de velocidade simulada seja diferente da medida. Como a metodologia da ASHRAE (2009) não especifica detalhes desta penalização, foi adotado um critério específico neste trabalho: A penalização é aplicada quando a diferença absoluta de direções entre o vetor simulado e o vetor medido é maior do que 45°. Um grau geral é atribuído pela média dos graus de todos os pontos envolvidos.

5.4.1. AVALIAÇÃO DA SIMULAÇÃO DO BENCHMARK DA ASHRAE

Este primeiro caso de validação tem por objetivo avaliar a capacidade do código na simulação das complexas características do escoamento do ar em um ambiente interno, em regime transicional não-isotérmico. Como o transporte de um contaminante é governado por advecção e difusão, dois parâmetros representativos destes fenômenos foram avaliados: a velocidade do escoamento e a energia cinética turbulenta (TKE). Em função da analogia de Reynolds, a difusividade turbulenta de massa é relacionada à viscosidade turbulenta através do número de Schmidt. Nos modelos de viscosidade turbulenta, adotados nesta tese, a viscosidade é calculada em função de TKE. Assim, os resultados destas variáveis de campo, produzidas pela simulação, foram comparados

com seus valores medidos pela ASHRAE (2009). Estes resultados foram analisados em 112 pontos, distribuídos em 10 eixos de medição, 5 no plano médio longitudinal ao escoamento principal ($x = 0,22\text{m}$, $0,69\text{m}$, $1,14\text{m}$, $1,60\text{m}$ e $2,05\text{m}$), e 5 no plano médio transversal ($y = 0,22\text{m}$, $0,69\text{m}$, $1,14\text{m}$, $1,60\text{m}$ e $2,05\text{m}$). Em cada eixo, os pontos de medição são separados por uma distância vertical de 6" ($0,15\text{m}$). A figura a seguir ilustra a disposição dos eixos de medição no domínio.

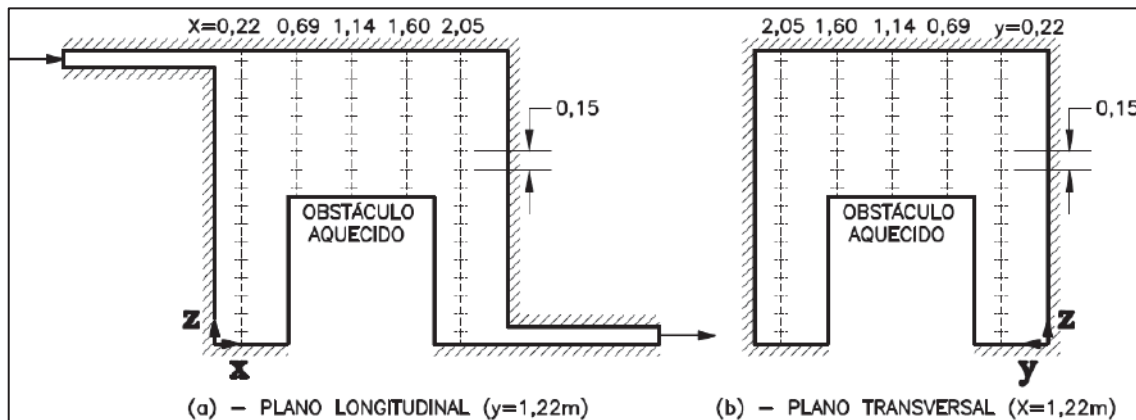


Figura 5.5 Disposição dos eixos de medição no domínio do benchmark da ASHRAE.

5.4.2. AVALIAÇÃO DA SIMULAÇÃO DO BENCHMARK DE LABORATÓRIO

Este caso de validação tem por objetivo avaliar a capacidade do código na simulação da eficiência de ventilação produzida pelo modo de ventilação por mistura (MV) em uma aplicação real de laboratório. O trabalho de JIN *et al* (2012), usado como *benchmark*, não apresenta os valores dos campos de velocidade, apenas a eficácia de ventilação medida. Assim, os valores da eficácia de ventilação da simulação foram comparados com os valores medidos por JIN *et al* (2012). Foram adotados os valores médios ao longo de 3 eixos de medição: P1, P6 e P8 (conforme figura 5.2). Estes eixos foram escolhidos em função de sua distribuição espacial na sala, e porque os resultados de suas medições encontram-se disponíveis no trabalho de JIN *et al* (2012). Para este caso, a eficácia de ventilação de um ponto é definida pela razão entre a concentração de contaminante na exaustão e no ponto considerado.

5.4.3. AVALIAÇÃO DA SIMULAÇÃO DO BENCHMARK HOSPITALAR

Este caso de validação tem por objetivo avaliar a capacidade do código na simulação da eficiência de ventilação produzida pelo modo de ventilação por deslocamento positivo (DV) em uma aplicação real hospitalar. O trabalho de YIN *et al* (2009), usado como *benchmark*, apresenta os valores dos campos de velocidade e eficácia de ventilação medida. Assim, os valores de velocidade e de eficácia de ventilação da simulação foram comparados com os valores medidos por YIN *et al* (2009). Para os campos de velocidade, foram adotados os valores medidos em 5 eixos de medição: P1, P3, P5, P7 e P8 (conforme figura 5.4). Para os campos de eficácia de ventilação, foram adotados os valores medidos na zona de respiração ($h = 1,60\text{m}$) de 4 eixos de medição: TG1, TG2, TG3 e TG5 (conforme figura 5.4). Estes eixos foram escolhidos em função de sua distribuição espacial na região entre o paciente e o profissional de saúde, e porque os resultados de suas medições encontram-se disponíveis no trabalho de YIN *et al* (2009). Para este caso, a eficácia de ventilação de um ponto é definida pela razão entre a concentração de contaminante na exaustão e no ponto considerado.

5.5. METODOLOGIA DE SIMULAÇÃO

5.5.1. MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICA- CARACTERÍSTICAS COMUNS AOS CÓDIGOS

Todos os códigos envolvidos são baseados no modelo dos volumes finitos. O domínio contínuo é discretizado nos pontos definidos pela malha associada. As equações de conservação, em regime permanente, são solucionadas simultaneamente, para cada ponto da malha, em um processo iterativo, tal como descrito na seção 3.2.3, até que o critério de convergência seja atendido. Este critério é baseado no erro residual relativo à equação de transporte de cada variável ϕ envolvida (equação 3.53). A forma algébrica da equação de conservação é similar a equação (3.52), mas nestes casos de validação, a formulação dos problemas se dá em regime permanente, e esta equação se torna:

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad . \quad (5.1)$$

O algoritmo SIMPLE (PATANKAR *et* SPALDING, 1972), é utilizado para acoplamento pressão-velocidade.

A modelagem de turbulência usa a formulação RANS das equações, com hipótese da viscosidade turbulenta, tal como definido pelas equações (3.22), (3.28) e (3.29), retirando-se o termo transiente. Nesta configuração, as equações (3.28) e (3.29) podem ser escritas como:

- a) Formulação RANS, em regime permanente, para Equação da Conservação de Quantidade de Movimento, com hipótese da viscosidade turbulenta:

$$\nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P + (\nu + \nu_t) \nabla^2 \mathbf{U} + \bar{S}_{M,\rho} \quad . \quad (5.2)$$

- b) Formulação RANS, em regime permanente, para Equação da Conservação da Energia (interna), com hipótese da viscosidade turbulenta:

$$\mathbf{U} \cdot \nabla \bar{T} = \left(\alpha + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \nabla^2 \bar{T} \quad . \quad (5.3)$$

O modelo de turbulência específico adotado em cada código será especificado nas próximas seções, mas todos são baseados naqueles já descritos na seção 3.2.2.

O modelo de mistura homogênea foi selecionado para a modelagem do transporte do contaminante passivo. Neste modelo, o fluido é uma mistura homogênea de ar e contaminante (SF6), e os campos de velocidade, pressão, turbulência e temperatura são comuns às duas fases (ANSYS, 2012a, 2012b). A solução da equação de transporte convectivo-difusivo de contaminante em regime permanente (5.4) promove o cálculo do valor da fração mássica média ($\bar{\chi}_c$) de contaminante em cada ponto.

$$\rho \mathbf{U} \cdot \nabla \bar{\chi}_c = -\nabla \cdot \dot{\mathbf{J}}_c + \rho \bar{\chi}_c \quad , \quad (5.4)$$

onde $\dot{\mathbf{J}}_c$ é o vetor fluxo difusivo equivalente de contaminante, considerando-se a hipótese de viscosidade turbulenta e a analogia de Reynolds, discutidas nas seções 3.2.2 e 4.3.1.

Os gases envolvidos (ar e SF6) foram modelados como gases ideais, e suas propriedades constituintes foram consideradas constantes, em função das premissas discutidas na seção 3.1, e são apresentadas na tabela a seguir.

Tabela 5.1 Propriedades dos gases envolvidos nas simulações

Propriedade (temperatura de referência: 20°C)	ar	SF6
Massa específica ρ_o ($kg.m^{-3}$)	1,204	6,170
Massa molecular M_o ($kg.kmol^{-1}$)	29,0	146,0
Viscosidade dinâmica μ_o ($kg.m^{-1}.s^{-1}$)	$1,82 \times 10^{-5}$	$1,83 \times 10^{-5}$
Calor específico c_{po} ($J.kg^{-1}.K^{-1}$)	$1,006 \times 10^3$	$1,044 \times 10^3$
Condutividade térmica k ($W.m^{-1}.K^{-1}$)	$2,57 \times 10^{-2}$	$2,61 \times 10^{-2}$

A propriedade resultante da mistura é determinada pela média ponderada em função da fração mássica (ANSYS, 2012a, 2012b). O efeito da variação da massa específica no empuxo térmico só é considerado na equação da conservação da quantidade de movimento (5.2), pela inclusão de um termo fonte (equação 3.8), tal como discutido na seção 3.1.

5.5.2. MODELAGEM MATEMÁTICA DO TERMO DE TRANSPORTE DIFUSIVO DE CONTAMINANTE

A modelagem matemática do transporte de um contaminante passivo, usando-se a formulação RANS, a Lei de Fick, a hipótese de viscosidade turbulenta e a analogia de Reynolds, promove a formulação do fluxo equivalente de acordo com a equação a seguir:

$$\dot{J}_c = -(\rho D_b + \mu_t/Sc_t)\nabla \bar{\chi}_c \quad (5.5)$$

Onde D_b é a difusividade molecular, μ_t é a viscosidade turbulenta, e Sc_t é o número de Schmidt turbulento, que, pela analogia de Reynolds, é a constante de proporcionalidade entre a difusividade turbulenta de quantidade de movimento e de massa ($Sc_t = \nu_t/D_t$).

D_b foi estimado pelo modelo oriundo da teoria cinética de Chapman-Enskog, conforme metodologia apresentada por BIRD *et al* (2002):

$$D_b = 0,0018583 \sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right) \frac{1}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{D,AB}}} , \quad (5.6)$$

onde $\Omega_{D,AB}$ é a integral de colisão para a difusão, função da temperatura adimensional kT/ε_{AB} , e :

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B) \quad (5.7)$$

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B} . \quad (5.8)$$

O resultado da aplicação deste modelo para a estimativa da difusividade molecular de SF6 no ar encontra-se resumido na tabela 5.2 a seguir:

Tabela 5.2 Resumo do cálculo estimativo da difusividade molecular dos gases envolvidos nas simulações

Gás A – SF6			Gás B - Ar			Mistura				
M_A	σ_A	ε_A/K	M_B	σ_B	ε_B/K	σ_{AB}	ε_{AB}/K	KT/ε_{AB}	$\Omega_{D,AB}$	D_b
	(A)	(K)		(A)	(K)	(A)	(K)	(K)		(cm ² /s)
146	4,9	245	29	3,62	97	4,26	154,3	1,919	1,091	0,097

Uma análise da acurácia desta estimativa pode ser realizada pela comparação do valor de D_b calculado por este método, com o valor disponível na literatura. A tabela 17.1.1, de BIRD *et al* (2002), apresenta o valor de D_b igual a 0,144 cm².s⁻¹, para a difusividade molecular de CO2 em N2. O valor de D_b , para esta mistura, calculado de

acordo com o procedimento anteriormente descrito produz o valor de $0,148 \text{ cm}^2.\text{s}^{-1}$. Apesar da diferença de 3%, ambos pertencem à mesma ordem, que também é a ordem do resultado apresentado na tabela 5.2. O guia de teoria do FLUENT (ANSYS, 2012b) menciona que a acurácia na estimativa da difusividade molecular não é geralmente necessária, dado que, para o transporte turbulento, a magnitude da difusão turbulenta é consideravelmente maior do que a da difusão molecular.

A magnitude da difusão turbulenta é governada pela difusividade turbulenta de quantidade de movimento, uma propriedade do escoamento, através do número de Schmidt (Sc_t). BIRD *et al* (2002) mencionam que Sc_t é da ordem de 1, assim como Pr_t , para gases. Esses autores mencionam que valores na literatura reportam uma variação entre 0,5 e 1,0 (BIRD *et al*, 2012). O valor padrão utilizado por cada software está mostrado na tabela a seguir:

Tabela 5.3 Valor padrão do número de Schmidt turbulento de cada código utilizado

Código	Sc_t
CFX	0,90
CONTAM/CFD-0	0,71
FLUENT	0,70

Estes valores, retirados dos guias de teoria de cada código (ANSYS, 2012a, 2012b; WALTON *et* DOLS, 2013), apesar de ligeiramente diferentes, pertencem à mesma ordem, e estão dentro da faixa reportada na literatura. Por este motivo, cada código foi utilizado com seu valor padrão associado.

5.5.3. MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICA- CARACTERÍSTICAS ESPECÍFICAS DE CADA CÓDIGO

Os códigos envolvidos apresentam algumas características específicas que são diferentes, principalmente na disponibilidade de modelos de turbulência, geração de malha, especificação das condições de contorno e análise de convergência.

a) Disponibilidade de Modelos de Turbulência

Os modelos de turbulência disponibilizados pelo CONTAM/CFD-0 são restritos ao *zero-equation* e ao $\kappa\epsilon$. O modelo *zero-equation* é um modelo de viscosidade turbulenta de ordem zero, baseado na teoria do comprimento de mistura. Os estudos previamente publicados, baseados no código CONTAM/CFD-0, bem como sua validação prévia (WANG *et* CHEN, 2007b), foram conduzidos com a utilização deste modelo de turbulência. A documentação do módulo CFD-0 não esclarece a especificação completa do modelo de turbulência $\kappa\epsilon$ disponibilizado, que só foi introduzido na última atualização (versão 3.1), utilizada nesta tese. Em função da ausência desta especificação completa, adotou-se a premissa de que se trata do modelo $\kappa\epsilon$ padrão (LAUNDER *et* SPALDING, 1974), tal como discutido na seção 3.2.2.b. Em função de sua ordem superior ao modelo *zero-equation*, e de seu uso consagrado (ZHAI *et al*, 2007), o modelo $\kappa\epsilon$ foi selecionado para uso com o código CONTAM/CFD-0.

Os códigos CFX e FLUENT apresentam diversas opções de modelos de turbulência. Em função do desempenho consistente nos estudos de ZHAI *et al* (2007), ZHANG *et al* (2007) e CHEN *et* WANG (2009), realizados para a classe de problemas de escoamento do ar em ambientes internos, o modelo RNG- $\kappa\epsilon$, tal como apresentado na seção 3.2.2.c foi selecionado para uso com estes códigos. Em seu artigo de revisão bibliográfica, ZHAI *et al* (2007) mencionam que a ANSYS enfatiza o uso do modelo SST- $\kappa\omega$ para o código CFX. Em seu estudo de comparação do desempenho de vários modelos de turbulência, CHEN *et* WANG (2009) utilizaram o código FLUENT, na simulação do *benchmark* da ASHRAE (2009) e também testaram o modelo SST- $\kappa\omega$, dentre outros. Em seus resultados, o desempenho do modelo RNG- $\kappa\epsilon$ foi superior ao do SST- $\kappa\omega$. Por estas razões, o modelo SST- $\kappa\omega$, tal como apresentado na seção 3.2.2.e, também foi selecionado para uso com o código CFX. Este modelo não foi utilizado no código FLUENT face aos resultados comparativos já obtidos por CHEN *et* WANG (2009).

b) Geração de malha

O código CONTAM/CFD-0 não apresenta um módulo de geração automática de malha. O código só permite a geração manual de malhas estruturadas, com elementos hexagonais. Esta característica restringe, ou pelo menos torna mais complexa, a

aplicação do código a geometrias não triviais. Esta característica também não permite a aferição da qualidade da malha, através do cálculo automático de parâmetros como a razão de aspecto. A qualidade da malha gerada é totalmente relacionada à habilidade do usuário, e esta característica pode produzir um considerável efeito no erro numérico da solução.

Os códigos CFX e FLUENT permitem o uso de malhas geradas automaticamente pelo software de geração de malhas da ANSYS (*meshing*), na plataforma de pré-processamento (*Workbench*). Este software permite a aplicação de malhas estruturadas e não-estruturadas, com elementos hexagonais e tetraédricos. Também disponibiliza uma série de recursos, como refinamento em regiões de interesse, controle da posição do 1º nó (para validade do modelo de turbulência) e controle da razão de aspecto. A geração é totalmente automática, produzida pelo algoritmo do software, e permite a avaliação de diversos parâmetros de qualidade, como razão de aspecto, qualidade ortogonal e assimetria. Neste trabalho, os dois códigos, CFX e FLUENT, foram operados com a mesma malha, gerada por este software. A geometria mais simples, associada ao *benchmark* da ASHRAE (2009), foi modelada com malha estruturada e não-estruturada. As geometrias mais complexas dos demais casos de validação foram representadas por malhas não-estruturadas, com elementos tetraédricos. A posição do 1º nó foi controlada, em função do modelo de turbulência associado (valor alvo de y^+ entre 30 e 200, para o modelo RNG- $\kappa\epsilon$). A taxa de variação espacial da dimensão de elemento de malha foi restrita a 1,2, e a qualidade da malha gerada foi analisada pelos parâmetros de razão de aspecto, qualidade ortogonal e assimetria, em função das premissas do manual do programa (ANSYS, 2012c).

As figuras a seguir ilustram exemplos das malhas geradas pelos diferentes softwares. A figura 5.6 apresenta o modelo do *benchmark* de laboratório, do código CONTAM/CFD-0, com a malha de uma seção transversal arbitrária. A figura 5.7 apresenta a malha da mesma seção, mas gerada pelo software *meshing* da ANSYS, para uso com os códigos CFX e FLUENT.

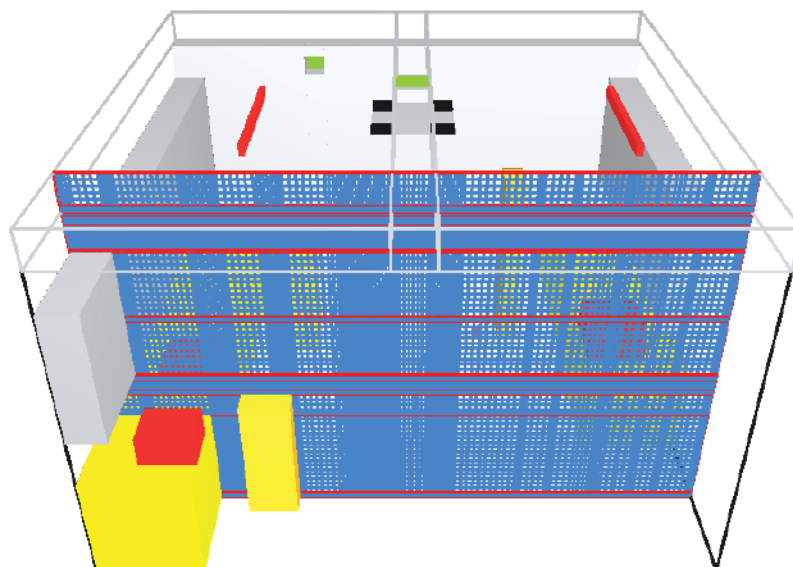


Figura 5.6 Configuração geral do modelo do benchmark de laboratório, utilizado no código CONTAM/CFD-0, com a malha gerada para uma seção transversal

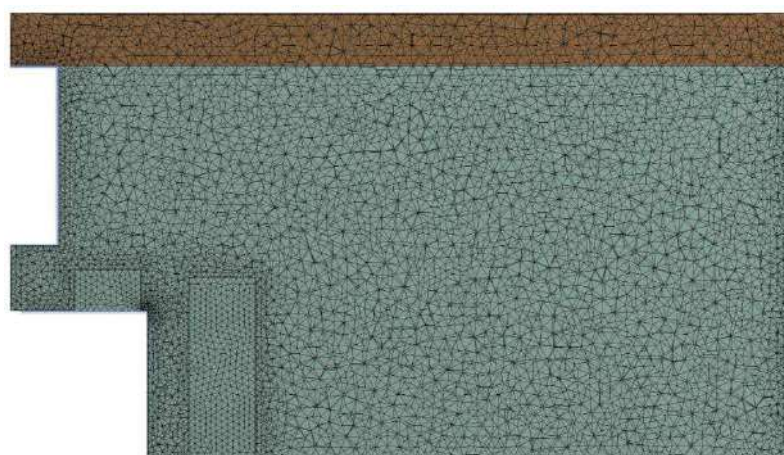


Figura 5.7 Malha gerada para a mesma seção transversal do benchmark de laboratório, pelo software *meshing* da ANSYS, para uso com os códigos CFX e FLUENT

c) Condições de contorno e Termos-Fonte

O código CONTAM/CFD-0 opera o módulo CFD integrado ao CONTAM. A zona CFD (modelada pelo módulo CFD-0) é integrada às outras zonas (modeladas pelo CONTAM), que são tratadas com a premissa de mistura perfeita, e ao ambiente externo. Cada zona do CONTAM é representada por um nó, para o qual a pressão, a temperatura e a concentração de contaminantes são armazenados (WALTON *et* DOLS, 2013). As

zonas são interconectadas através de trajetórias de fluxo (*flow paths*), inseridas pelo usuário, com objetivo de modelar os elementos que promovem a intercomunicação de ar entre os ambientes do modelo, como frestas, portas, dutos e ventiladores. Cada trajetória de fluxo precisa ser caracterizada. Uma fresta e um duto podem ser caracterizados pela sua resistência ao fluxo de ar em função da diferença de pressão associada. Um ventilador pode ser caracterizado pela sua vazão de ar. Após a completa caracterização, o programa resolve um sistema de equações cujas incógnitas são as pressões em cada nó (zona) e as vazões em cada trajetória de fluxo. Por exemplo, considerando-se o caso de um sistema de ventilação central que promove a admissão de ar exterior da atmosfera e abastece a vários ambientes simultaneamente, o programa calcula as vazões e a pressão em cada ambiente, a partir da vazão de ventilador, e das características das resistências dos dutos, das conexões e das frestas associadas. O programa permite ainda que uma das zonas possa ser modelada usando-se a técnica de CFD. Neste caso, cada interface entre a zona CFD e as demais zonas será identificada e representada por um nó. As informações de pressão, temperatura e concentração de contaminantes são impostas ao módulo CFD-0 como condições de contorno. A conversão da pressão em vazão, utilizada pelo módulo CFD-0, é realizada a partir de uma relação do tipo “power-law”, dada pela equação a seguir:

$$\dot{Q}_i = C_{d,i} A_i (\Delta P_i / \rho)^{0,5} \quad . \quad (5.9)$$

Onde $C_{d,i}$ é o fator de descarga que caracteriza o elemento de entrada de ar, A_i é sua área transversal e ΔP_i é a perda de carga do escoamento sobre o elemento. O fator de descarga é determinado experimentalmente. Valores variam entre 0,5, para aberturas maiores e 0,65 para aberturas menores, como frestas (WALTON *et* DOLS, 2013). Em todos os cenários modelados neste trabalho, estes coeficientes foram ajustados por meio de simulações prévias realizadas no CONTAM (sem o acoplamento com o módulo CFD-0), para garantir que a vazão, e consequentemente a velocidade, imposta como condição de contorno ao módulo CFD-0 estivesse correta. Essencialmente, as demais zonas envolvidas na simulação foram criadas apenas para impor as condições de contorno corretas ao módulo CFD-0. No módulo CFD-0, o usuário modela as dimensões e a posição relativa da entrada de ar, mas as condições de contorno de vazão são impostas indiretamente pelo CONTAM, conforme a metodologia anteriormente

descrita. A condição de contorno da temperatura de insuflação é especificada diretamente pelo usuário. O código não permite ao usuário a especificação das condições de contorno de turbulência nas entradas de ar. Também não há, na documentação ou no programa, uma descrição da metodologia utilizada para especificação destas condições de contorno. VERSTEEG *et* MALALASEKERA (2007) mencionam que os códigos comerciais de CFD geralmente estimam as condições de contorno turbulentas na entrada de ar em função da intensidade turbulenta (normalmente entre 1% e 6%) e uma escala de comprimento. Supõe-se que esta estratégia seja utilizada pelo código, em função das dimensões do dispositivo de entrada de ar e da velocidade associada. As condições de contorno das saídas de ar são realizadas de forma similar às de entrada.

A modelagem da inserção de contaminantes pelo código CONTAM/CFD-0 é realizada pela inclusão de um termo-fonte, representativo da geração associada. Os parâmetros gerais são definidos no CONTAM, e o posicionamento do local de geração é especificado no módulo CFD-0. O código CONTAM/CFD-0 também permite a inclusão de termos-fonte de produção de calor nos ambientes, na forma de blocos impermeáveis ao ar (paredes), definidos diretamente no módulo CFD-0, de modo a modelar a presença dos equipamentos e pessoas. O código CONTAM/CFD-0 não permite a inclusão de termos-fonte de produção de quantidade de movimento. Por este motivo, a modelagem dos difusores de insuflação de ar foi realizada de acordo com o *basic model*, tal como descrito por LOOMANS (1998). Este modelo substitui o difusor por uma abertura com a mesma área efetiva do difusor.

Os códigos CFX e FLUENT permitem o controle total da especificação das condições de contorno. Para as entradas de ar, foram especificadas as vazões envolvidas, a temperatura e a intensidade turbulenta. Para as saídas de ar, foi especificada a pressão relativa. Estes códigos permitem a modelagem da inserção dos contaminantes por termos-fonte, mas os mesmos foram inseridos de forma similar aos experimentos dos *benchmarks*: através de um fluxo de ar, à baixa vazão e velocidade, com 1% de concentração de contaminante. Os códigos CFX e FLUENT permitem a inclusão de termos-fonte de produção de quantidade de movimento. Por este motivo, e porque este se provou adequado em simulações similares (SREBRIC *et* CHEN, 2001), o

momentum method foi utilizado para a modelagem do difusor de insuflação de ar. Este método aplica as reais dimensões do difusor, mas separa as condições de contorno para a equação da continuidade e da conservação da quantidade de movimento. A vazão de ar é governada pela equação da continuidade, e um termo-fonte na equação da quantidade de movimento é aplicado para aceleração do escoamento à velocidade de descarga, nas direções de insuflação associadas.

As condições de contorno nas paredes são basicamente representadas pelas condições de impenetrabilidade e não-eskorregamento (*no-slip*). A condição de impenetrabilidade é automaticamente especificada como o valor nulo da velocidade normal na face da parede. A condição de não-eskorregamento é imposta, pelo código, como um termo-fonte que representa a tensão de cisalhamento na parede, no balanço de quantidade de movimento para o 1º volume de controle junto à parede. O valor da tensão de cisalhamento é calculado automaticamente pelo código em função do modelo de turbulência e da variável y^+ . As condições de contorno de produção e dissipação das variáveis turbulentas na parede também são calculadas automaticamente pelo código, em função do modelo de turbulência associado. A taxa de dissipação de calor das paredes não-adiabáticas deve ser especificada. Não há, na documentação do código CONTAM/CFD-0, o descritivo relacionado ao tratamento das paredes. Foi considerado que o código utiliza o tratamento pelas funções de paredes (*wall functions*), características do modelo $k\epsilon$, tal como descrito na seção 3.2.2.b. No caso dos códigos CFX e FLUENT, as paredes foram tratadas em função do modelo de turbulência associado, tal como descrito nesta e na seção 3.2.2. A dissipação térmica associada aos equipamentos foi especificada nas paredes associadas.

A especificação detalhada de cada condição de contorno associada aos casos de validação está descrita nos anexos A,B e C.

O Anexo A apresenta a especificação das condições de contorno modeladas na validação do *benchmark* da ASHRAE (2009).

O Anexo B apresenta a especificação das condições de contorno modeladas na validação do *benchmark* de laboratório de JIN *et al* (2012).

O Anexo C apresenta a especificação das condições de contorno modeladas na validação do *benchmark* hospitalar de YIN *et al* (2009).

d) Esquemas de Interpolação

Os esquemas de interpolação promovem uma aproximação dos fluxos convectivos e difusivos das variáveis transportadas nas faces dos volumes de controle, em função dos valores definidos nos nós da malha. Nos problemas de transporte difusivo-convectivo, é desejável que o esquema apresente as propriedades de conservatividade (*conservativeness*), fronteirabilidade (*boundedness*) e transportatividade (*transportiveness*, VERSTEEG *et* MALALASEKERA, 2007). A propriedade de conservatividade garante que o fluxo por uma face seja representado de forma consistente, quando estimado para o nó à montante e à jusante da face considerada. Caso esta propriedade não seja respeitada, o esquema numérico promove a criação ou destruição da propriedade transportada, e a conservação não é garantida. A propriedade de fronteirabilidade garante que, na ausência de fontes, o valor de uma propriedade transportada em um nó seja limitado pelo seu valor nos nós vizinhos. Um esquema de interpolação que produza um sistema de equações representado por uma matriz de coeficientes que seja diagonalmente dominante promove o atendimento deste critério. A matriz é diagonalmente dominante quando os coeficientes da sua diagonal (B_{ii}) são muito maiores do que os demais coeficientes (B_{ij}). Esta situação (dominância diagonal da matriz de coeficientes) também atende ao critério de Scarborough, que estabelece uma condição suficiente para a convergência do método iterativo. A propriedade de transportatividade garante que o esquema considere a magnitude do efeito convectivo sobre o difusivo (Péclet) e a direção do escoamento, na interpolação do valor da variável na face considerada.

Outra importante característica dos esquemas de interpolação diz respeito à ordem do erro de truncamento, em relação às aproximações pela séries de Taylor.

Os códigos CFX e FLUENT apresentam diversas opções de esquemas de interpolação. Para estas simulações, foi selecionado o esquema upwind de 2ª ordem (TVD com funções limitadoras), para o fluxo convectivo. Neste esquema, o valor da variável na face é calculado por:

$$\phi_f = \phi_{P,up} + \psi_{lim} \nabla \phi_{P,up} \cdot r_{c \rightarrow f} , \quad (5.10)$$

onde $\phi_{P,up}$ é o valor da variável no nó à montante da face, $\nabla\phi_{P,up}$ é o seu gradiente naquele nó, $r_{c \rightarrow f}$ é o vetor deslocamento entre o nó à montante e a face considerada e ψ_{lim} é a função limitadora do gradiente. Diversas opções de função limitadora estão disponíveis, mas foi utilizada a função padrão, baseada na técnica Min-mod. Este esquema foi selecionado porque atende às premissas de conservatividade, fronteirabilidade e transportatividade, já foi utilizado com sucesso em trabalhos similares (CHEN *et al*, 2014), possui precisão de 2ª ordem, e é livre de instabilidades numéricas (presentes em esquemas de ordem superior, como o QUICK), sendo recomendável por VERSTEEG *et MALALASEKERA* (2007) para o uso em simulações CFD. O termo difusivo é calculado pelo esquema de diferenças centradas (*central-differenced*), que também possui precisão de 2ª ordem.

O código CONTAM/CFD-0 só permite a escolha de dois esquemas de interpolação para o fluxo convectivo, ambos de 1ª ordem: Upwind e Power-law. O esquema upwind calcula o valor da variável na face por:

$$\phi_f = \phi_{P,up} \quad (5.11)$$

Este esquema respeita as premissas de conservatividade, fronteirabilidade e transportatividade, mas apresenta um problema clássico conhecido como falsa difusão (VERSTEEG *et MALALASEKERA*, 2007). Esta situação é caracterizada por divergências nos resultados, principalmente quando a malha não está alinhada ao escoamento, o que produz um efeito numérico similar ao do aumento da difusividade. Por este motivo, VERSTEEG *et MALALASEKERA* (2007) consideram que este método não é totalmente adequado para simulações precisas em CFD.

O esquema Power-law (PATANKAR, 1980) é derivado da equação unidimensional convectiva-difusiva. É um esquema que avalia a magnitude da convecção sobre a difusão, pelo número de Péclet de malha (Pe_f), avaliado na face considerada. Por exemplo, para a face oeste (w), em uma malha ortogonal, este número é avaliado por $(\rho u)_w / (\Gamma \delta / \delta x)$. Para valores de Pe elevados ($Pe > 10$), o método se transforma no upwind. Para valores de Pe entre 0 e 10, o fluxo é calculado por uma expressão polinomial (VERSTEEG *et MALALASEKERA*, 2007). Apesar da precisão de 1ª ordem, VERSTEEG *et MALALASEKERA* (2007) mencionam que este esquema

se mostrou útil na prática, em simulações de escoamentos, e por este motivo, foi adotado para o código CONTAM/CFD-0.

e) Análise da Convergência

Os códigos CFX e FLUENT apresentam vários recursos para se analisar e acelerar a convergência. Podem ser adotados diferentes critérios de convergência para os erros residuais de cada equação de transporte. Parâmetros podem ser monitorados, como a vazão através de uma superfície de interesse, para avaliação da convergência. O processo iterativo pode ser iniciado com uma malha mais grosseira, ou com um esquema de interpolação de 1ª ordem, e depois terminado com uma malha mais refinada e um esquema de interpolação de ordem superior, para acelerar a convergência.

O código CONTAM/CFD-0 apresenta poucos recursos deste tipo, e a análise da convergência está restrita ao erro residual. Este código não permite a especificação de diferentes critérios de convergência para cada equação de transporte. Permite a especificação de um critério diferente apenas para o transporte de contaminante. Este código também não permite que uma simulação seja interrompida, para análise dos resultados parciais, e depois retomada.

Nestes casos de validação, os erros residuais foram utilizados para análise de convergência. A solução foi considerada convergida quando os erros residuais atingiram valores limites de 10^{-4} para as equações de transporte de quantidade de movimento, variáveis turbulentas, e energia, e 10^{-6} para a equação de transporte de contaminante. No caso dos códigos CFX e FLUENT, foi adotado o critério de erro residual máximo igual a 10^{-6} para a equação de transporte de energia, em função da possibilidade de especificação de diferentes critérios para diferentes equações. O balanço global também foi analisado para as simulações realizadas neste códigos, como critério de análise de convergência. Nestes casos, o erro máximo associado (*imbalance*) foi definido como 0,01%.

5.5.4. MODELAGEM MATEMÁTICA E NUMÉRICA – RESUMO DAS CARACTERÍSTICAS

A tabela a seguir resume as características principais envolvidas na modelagem matemática e numérica dos casos de validação, em função das particularidades de cada código, discussões e justificativas precedentes.

Tabela 5.4 Características principais da modelagem matemática e numérica de cada código utilizado

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Método		Volumes finitos		
Regime		Permanente, incompressível, não-isotérmico		
Acoplamento Pressão - velocidade		SIMPLE		
Modelo de turbulência		RNG- $\kappa\epsilon$ / SST- $\kappa\omega$	$\kappa\epsilon$	RNG- $\kappa\epsilon$
Modelagem do transporte de contaminante		Modelo de mistura homogênea		
Esquema de interpolação do Termo convectivo		Upwind 2ª ordem	Power-Law	Upwind 2ª ordem
Critério de convergência (erro residual máximo)	continuidade	10^{-4}		
	quantidade de movimento	10^{-4}		
	Variáveis turbulentas	10^{-4}		
	energia	10^{-6}	10^{-4}	10^{-6}
	contaminante	10^{-6}		
Critério de convergência (imbalace)		0,01%	Não disp.	0,01%

5.6. RESULTADOS E ANÁLISES DAS SIMULAÇÕES

5.6.1. SIMULAÇÃO DO BENCHMARK DA ASHRAE

a) Teste de Convergência de Malha

Diversas malhas, com diferentes tamanhos, foram testadas, para o caso 2 (isotérmico). Para o teste de convergência de malha, foi selecionado, para avaliação, a velocidade em três pontos na zona de indução do jato de ar (P1, P2 e P3), acima do obstáculo, tal como mostrado na figura a seguir:

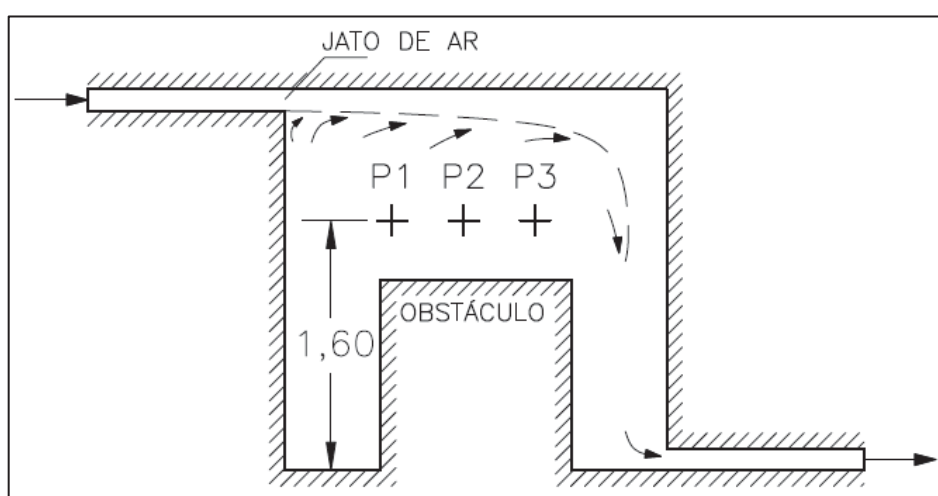


Figura 5.8 Pontos envolvidos no teste de convergência de malha para simulação do benchmark da ASHRAE

Para esta tarefa, o código CFX, com modelo de turbulência SST- $\kappa\omega$, foi selecionado para obter o resultado com a malha gerada pelo software da ANSYS (*meshing*). As malhas adotadas nas simulações com o código CFX compreendem um número aproximado de 1.300.000, 530.000 e 260.000 elementos tetraédricos. As malhas adotadas nas simulações com o código CONTAM/CFD-0 compreendem um número aproximado de 2.900.000, 1.900.000 e 1.500.000 elementos hexagonais. Estas malhas foram selecionadas para verificação do erro numérico associado, pelo teste do índice de convergência de malha, GCI (*grid convergence index*), conforme a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK *et al* (1993).

Os resultados do teste de refinamento em questão, apresentados no formato sugerido por CELIK et al (1993), para a malha gerada pela ANSYS (códigos CFX e FLUENT) encontram-se na tabela a seguir, bem como o erro numérico associado (GCI):

Tabela 5.5 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS

Número de elementos N_1, N_2, N_3	1.300.000, 530.000, 230.000		
Quantidade avaliada	$ U_{p1} $	$ U_{p2} $	$ U_{p3} $
r_{21}	1,29	1,29	1,29
r_{32}	1,32	1,32	1,32
ϕ_1	0,1355	0,0261	0,0364
ϕ_2	0,1419	0,0254	0,0321
ϕ_3	0,1567	0,0165	0,0064
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	0,1295	0,0262	0,0375
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	4,7 %	2,7 %	11,8 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	4,6 %	0,3 %	2,8 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	5,5 %	0,4 %	3,6 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	0,1295	0,0262	0,0375
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	10,4 %	35,0 %	80,1 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	9,6 %	3,0 %	14,3 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	10,9 %	3,8 %	20,8 %

Os resultados deste teste, para as malhas envolvidas na simulação com o código CONTAM/CFD-0, encontram-se na tabela a seguir:

Tabela 5.6 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam

Número de elementos N_1, N_2, N_3	2.900.000, 1.900.000, 1.500.00		
Quantidade avaliada	$ U_{p1} $	$ U_{p2} $	$ U_{p3} $
r_{21}	1,17	1,17	1,17
r_{32}	1,05	1,05	1,05
ϕ_1	0,0853	0,0331	0,0711
ϕ_2	0,0929	0,0404	0,0761
ϕ_3	0,1000	0,0498	0,0855
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	0,0842	0,0326	0,071
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	8,9 %	22,1 %	7,0 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	1,3 %	1,6 %	0,2 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	1,7 %	2,0 %	0,3 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	0,0842	0,0326	0,071
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	7,6 %	23,2 %	12,4 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	10,4 %	24,0 %	7,3 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	11,7 %	24,2 %	8,5 %

Para ambos os códigos, a malha mais fina foi selecionada, em função do menor erro numérico associado, tal como verificado pelo método GCI. É importante notar que, para a obtenção de um erro numérico compatível ao da ANSYS, torna-se necessário o uso de uma malha com uma quantidade de elementos consideravelmente maior pelo código CONTAM/CFD-0. O uso do CONTAM/CFD-0 com uma malha de tamanho próximo ao da ANSYS estaria relacionado a um erro numérico consideravelmente maior (24,2% do CONTAM/CFD-0 para a malha de 1.900.000 elementos contra 5,5% da ANSYS, para a malha de 1.300.000 elementos).

b) Resultados das Simulações – Caso 2

Os resultados das simulações dos perfis de velocidade do caso 2 para alguns eixos representativos da solução numérica, bem como os dados experimentais correspondentes encontram-se na figura a seguir:

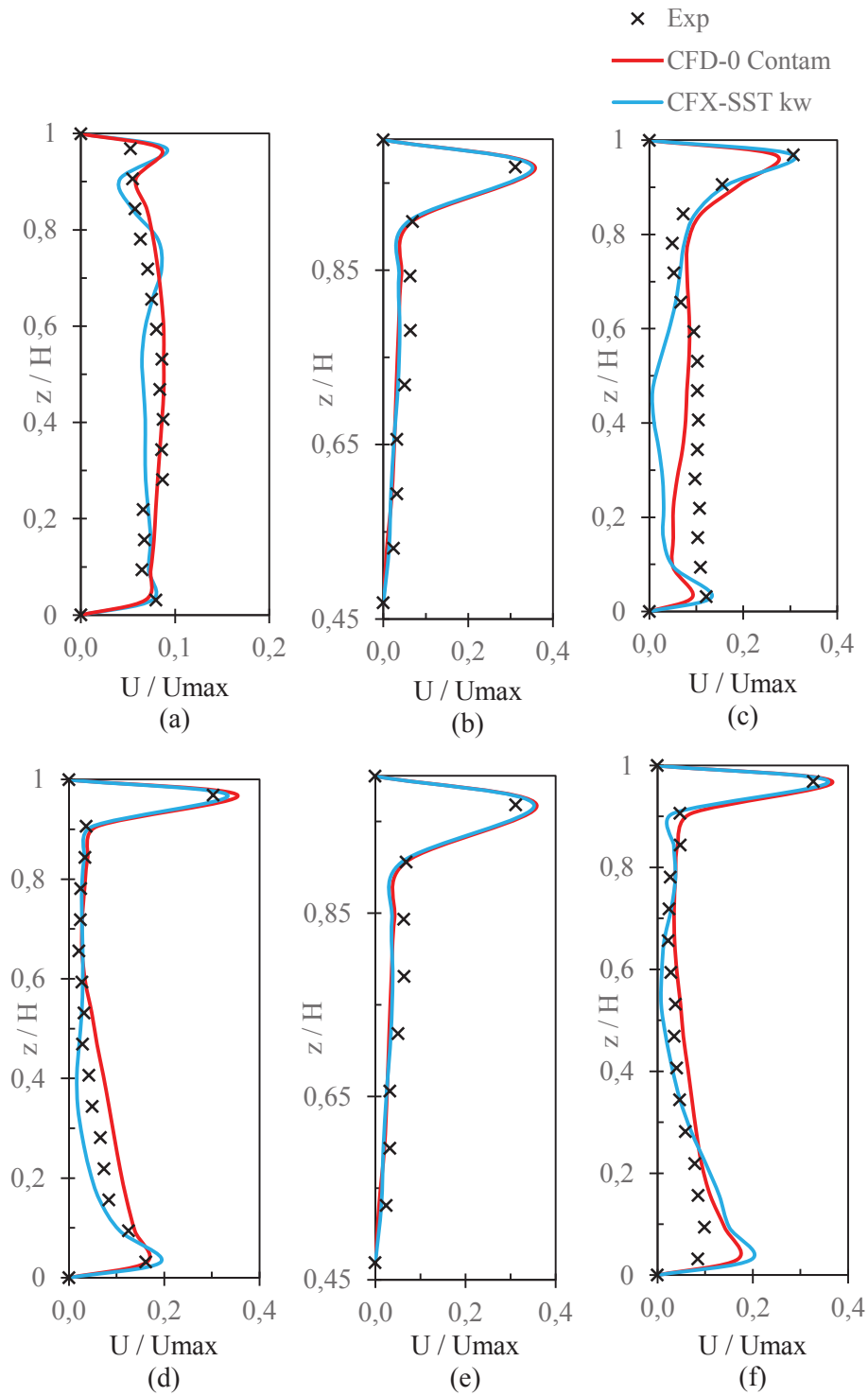


Figura 5.9 Perfis de velocidades em alguns eixos seleccionados, para a simulação do caso 2 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: $x =$ (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: $y =$ (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;

Os valores detalhados dos resultados deste teste encontram-se no Anexo F. Os valores das diferenças absolutas médias em cada eixo estão resumidos na tabela a seguir.

Tabela 5.7 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades – Caso 2 do benchmark da ASHRAE

	Eixo	CFD-0/CONTAM	CFX (SST- $k\omega$)
Plano longitudinal médio ($y = 1,22$ m)	x = 0,22 m	14 %	19 %
	x = 0,69 m	26 %	29 %
	x = 1,14 m	32 %	32 %
	x = 1,60 m	41 %	46 %
	x = 2,05 m	35 %	51 %
Plano transversal médio ($x = 1,22$ m)	y = 0,22 m	39 %	27 %
	y = 0,69 m	34 %	21 %
	y = 1,14 m	32 %	45 %
	y = 1,60 m	28 %	32 %
	y = 2,05 m	42 %	42 %
Média (sobre todos eixos)		32 %	34 %
Grau atribuído (de acordo com metodologia da ASHRAE)		2,2	2,0

c) Resultados das Simulações – Caso 3

Os resultados das simulações dos perfis de velocidade do caso 3 para alguns eixos representativos da solução numérica, bem como os dados experimentais correspondentes encontram-se na figura a seguir:

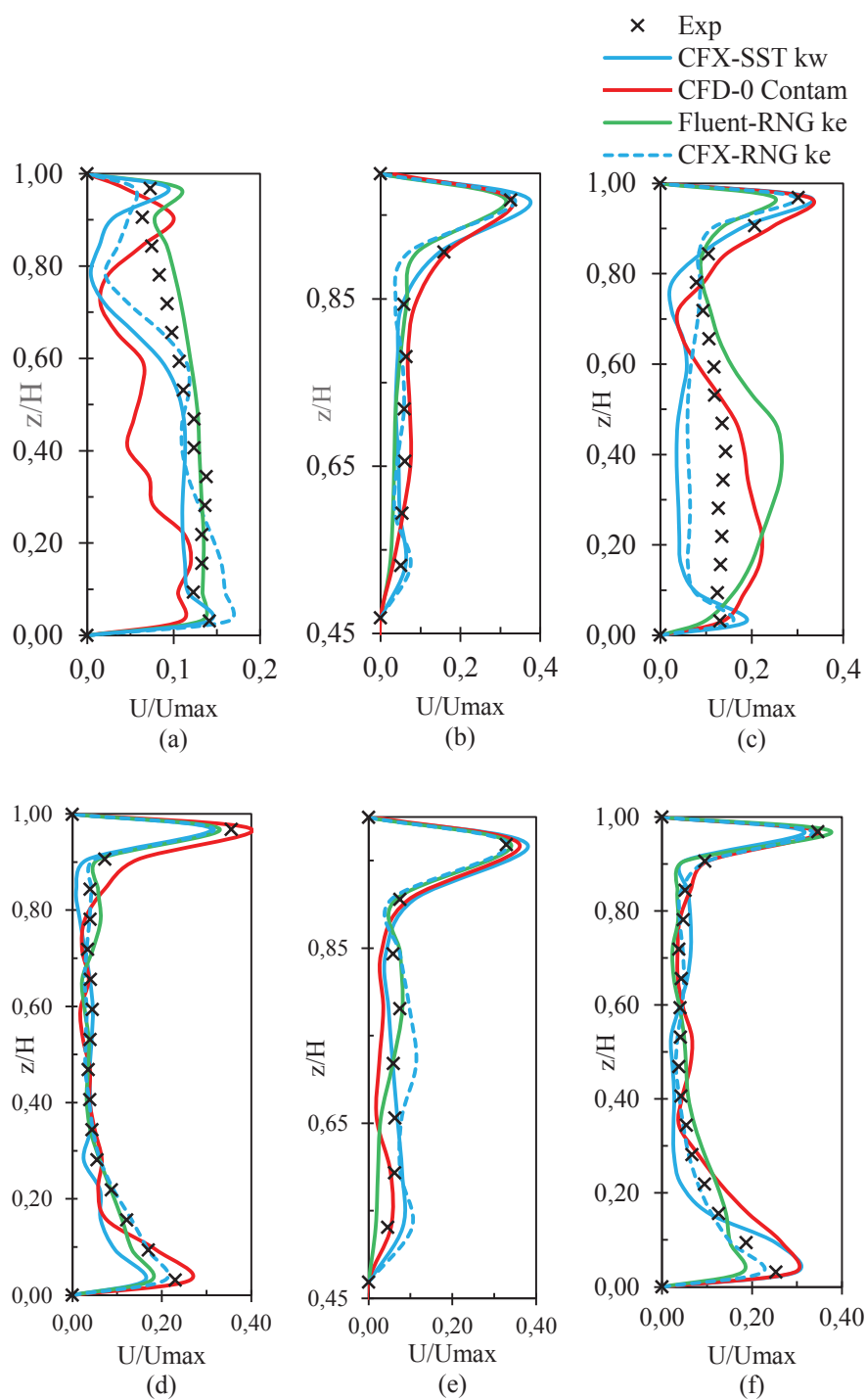


Figura 5.10 Perfis de velocidades em alguns eixos seleccionados, para a simulação do caso 3 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: $x =$ (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: $y =$ (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;

Os valores detalhados dos resultados deste teste também se encontram no Anexo F. Os valores das diferenças absolutas médias em cada eixo estão resumidos na tabela a seguir.

Tabela 5.8 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades – Caso 3 do benchmark da ASHRAE

	Eixo	CFD-0/ CONTAM	CFX (SST- $\kappa\omega$)	CFX (RNG- $\kappa\epsilon$)	FLUENT (RNG- $\kappa\epsilon$)
Plano longitudinal médio ($y = 1,22 \text{ m}$)	$x = 0,22 \text{ m}$	43 %	31 %	23 %	13 %
	$x = 0,69 \text{ m}$	26 %	53 %	49 %	17 %
	$x = 1,14 \text{ m}$	35 %	29 %	29 %	33 %
	$x = 1,60 \text{ m}$	19 %	20 %	28 %	32 %
	$x = 2,05 \text{ m}$	35 %	53 %	37 %	46 %
Plano transversal médio ($x = 1,22 \text{ m}$)	$y = 0,22 \text{ m}$	32 %	28 %	13 %	22 %
	$y = 0,69 \text{ m}$	40 %	45 %	29 %	48 %
	$y = 1,14 \text{ m}$	37 %	31 %	45 %	30 %
	$y = 1,60 \text{ m}$	34 %	32 %	37 %	44 %
	$y = 2,05 \text{ m}$	26 %	36 %	13 %	29 %
Média (sobre todos eixos)		33 %	36 %	30 %	31 %
Grau atribuído (de acordo com metodologia da ASHRAE)		2,1	2,0	2,3	2,4

Os resultados das simulações dos perfis de energia cinética turbulenta (TKE) do caso 3 para alguns eixos representativos da solução numérica, bem como os dados experimentais correspondentes encontram-se na figura a seguir:

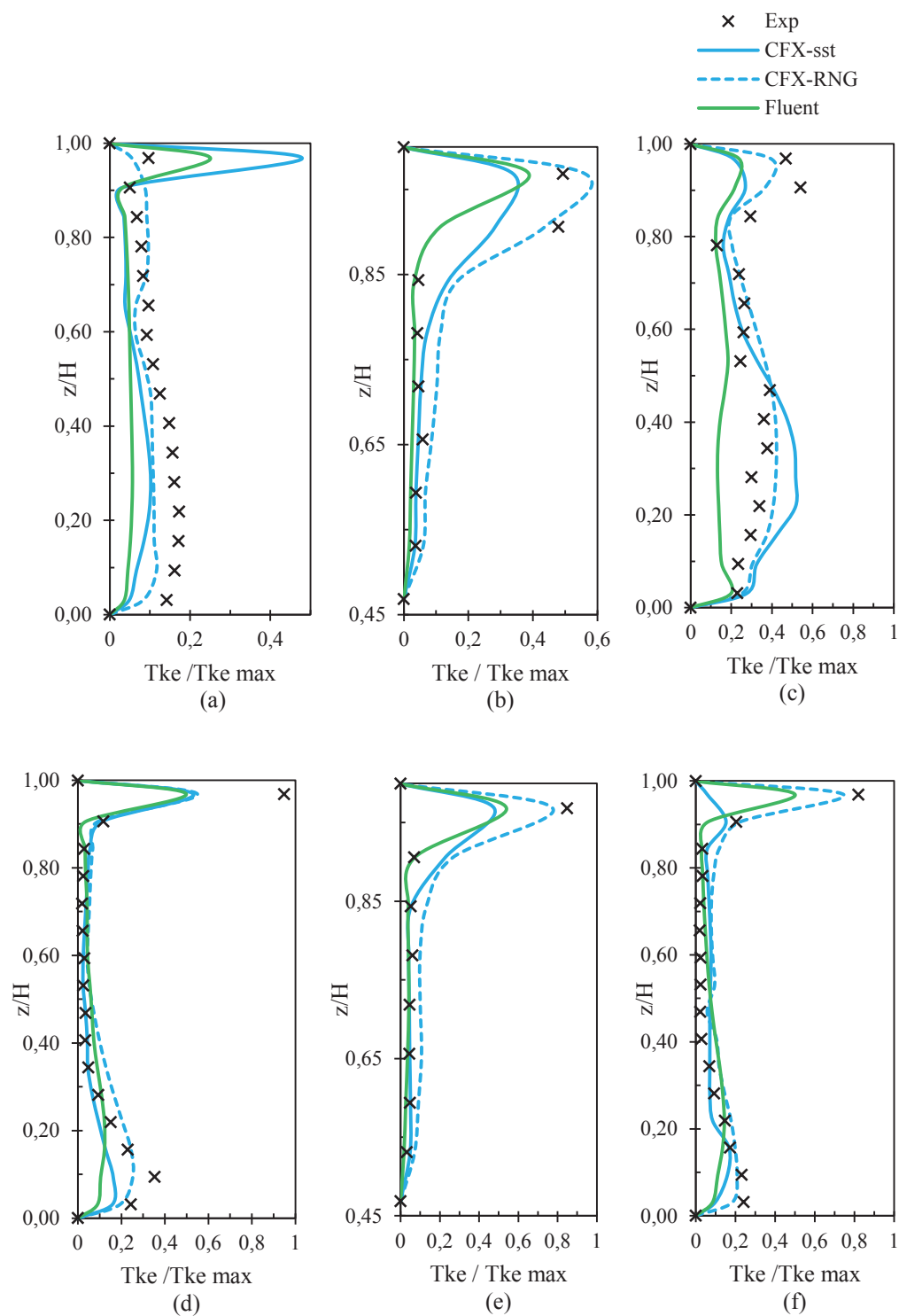


Figura 5.11 Perfis de energia cinética turbulenta (TKE) em alguns eixos selecionados, para a simulação do caso 3 do benchmark da ASHRAE. Plano longitudinal ao escoamento: $x =$ (a) 0,22m; (b) 1,60m; (c) 2,05m; Plano transversal ao escoamento: $y =$ (d) 0,22m; (e) 1,14m; (f) 2,05m;

Os valores detalhados dos resultados deste teste também se encontram no Anexo F. Os valores das diferenças absolutas médias em cada eixo estão resumidos na tabela a seguir.

Tabela 5.9 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de TKE – Caso 3 do benchmark da ASHRAE

	Eixo	CFX (SST- $\kappa\omega$)	CFX (RNG- $\kappa\epsilon$)	FLUENT (RNG- $\kappa\epsilon$)
Plano longitudinal médio ($y = 1,22$ m)	$x = 0,22$ m	47 %	32 %	57 %
	$x = 0,69$ m	45 %	45 %	39 %
	$x = 1,14$ m	27 %	85 %	38 %
	$x = 1,60$ m	49 %	96 %	42 %
	$x = 2,05$ m	40 %	201 %	43 %
Plano transversal médio ($x = 1,22$ m)	$y = 0,22$ m	125 %	37 %	66 %
	$y = 0,69$ m	22 %	29 %	48 %
	$y = 1,14$ m	46 %	120 %	28 %
	$y = 1,60$ m	20 %	134 %	43 %
	$y = 2,05$ m	143 %	45 %	88 %
Média (sobre todos eixos)		56 %	82 %	49 %
Grau atribuído (de acordo com metodologia da ASHRAE)		2,3	2,0	2,0

O código CONTAM/CFD-0 não produz resultados sobre os valores de energia cinética turbulenta (TKE) envolvidos na simulação, mas sobre a viscosidade turbulenta (μ_t). Esta é a razão deste código não ter sido incluído na tabela e no gráfico anteriormente apresentados. Uma análise do desempenho deste código na simulação da turbulência pode ser feita comparando-se os valores simulados para viscosidade

turbulenta com aqueles produzidos pelo FLUENT. Este código foi selecionado para esta comparação porque apresentou a menor diferença média relativa aos dados experimentais na simulação de TKE. Os valores das diferenças absolutas médias de viscosidade turbulenta em cada eixo estão resumidos na tabela a seguir.

Tabela 5.10 Resultados de simulações de viscosidade turbulenta [Pa.s]– Caso 3 do benchmark da ASHRAE

	Eixo	FLUENT (RNG-κϵ) [Pa.s]	CFD-0/ CONTAM [Pa.s]	diferença
Plano longitudinal médio (y = 1,22 m)	x = 0,22 m	$1,01 \times 10^{-3}$	$1,03 \times 10^{-3}$	2 %
	x = 0,69 m	$1,18 \times 10^{-3}$	$2,21 \times 10^{-3}$	87 %
	x = 1,14 m	$1,40 \times 10^{-3}$	$1,94 \times 10^{-3}$	39 %
	x = 1,60 m	$1,65 \times 10^{-3}$	$2,84 \times 10^{-3}$	72 %
	x = 2,05 m	$2,07 \times 10^{-3}$	$3,46 \times 10^{-3}$	67 %
Plano transversal médio (x = 1,22 m)	y = 0,22 m	$2,09 \times 10^{-3}$	$1,09 \times 10^{-3}$	-48 %
	y = 0,69 m	$1,41 \times 10^{-3}$	$2,94 \times 10^{-3}$	109 %
	y = 1,14 m	$1,48 \times 10^{-3}$	$1,98 \times 10^{-3}$	34 %
	y = 1,60 m	$1,58 \times 10^{-3}$	$3,14 \times 10^{-3}$	115 %
	y = 2,05 m	$2,43 \times 10^{-3}$	$1,97 \times 10^{-3}$	-19 %
Média (sobre todos eixos)		$1,63 \times 10^{-3}$	$2,26 \times 10^{-3}$	39 %

Os valores detalhados dos resultados deste teste também se encontram no Anexo F.

d) Análises dos Resultados das Simulações

Para as simulações do caso 2 (isotérmico), observa-se que o desempenho dos dois códigos avaliados (CFX e CONTAM-CFD/0) é similar para a previsão dos perfis de velocidades na região do obstáculo. Uma análise qualitativa dos perfis demonstra que o desempenho também é razoavelmente similar para os demais eixos, com exceção do eixo $x = 2,05\text{m}$, onde a a simulação do CFX apresentou o pior desempenho. As simulações de WANG *et* CHEN (2009) para este mesmo caso também apontaram um pior desempenho neste mesmo eixo, independentemente do modelo de turbulência adotado. Esses autores mencionam que se trata de uma região que apresenta um padrão de escoamento consideravelmente complexo, em função da interação entre o jato de insuflação, a parede oposta e o obstáculo.

Pode-se observar, pela comparação dos resultados dos casos 2 e 3, que a inclusão da ação do empuxo térmico convectivo aumenta a complexidade da simulação, e reduz a acurácia dos resultados simulados. A magnitude relativa da força de empuxo térmico sobre as forças inerciais pode ser avaliada pelo número de Arquimedes (Ar), que, de acordo com WANG (2007), pode ser expresso, para uma sala ventilada, por:

$$Ar_{room} = Gr_{room}/Re_{room}^3 , \quad (5.12)$$

onde Gr é o número de Grashof para a sala, calculado por (WANG, 2007):

$$Gr_{room} = \beta g \dot{Q} l^3 / \rho c_p \dot{V} \nu^2 , \quad (5.13)$$

onde β é o coeficiente de expansão térmica volumétrico do ar, g é a aceleração da gravidade, \dot{Q} é a potência calorífica total envolvida, l é a dimensão característica da sala, \dot{V} a vazão volumétrica de ar e ν a viscosidade cinemática.

Re_{room} é o número de Reynolds para a sala, calculado por (WANG, 2007):

$$Re_{room} = \dot{V} / l \nu . \quad (5.14)$$

Para o caso 3 deste benchmark, a ordem de grandeza do número de Arquimedes é igual a 1, de modo que as forças associadas ao empuxo térmico são da mesma ordem do que as forças inerciais, agregando complexidade à simulação.

Para as simulações da energia cinética turbulenta, observa-se que os códigos CFX e FLUENT apresentaram desempenho relativamente similar, e marginalmente aceitável, para o caso 3. Para todos os códigos analisados, a ordem de grandeza da média da energia cinética turbulenta simulada é a mesma, de $10^{-2} J.kg^{-1}$. Esta também é a ordem de grandeza da média dos dados apresentados pela ASHRAE (2009), para as medições de TKE do caso 3. O desempenho da modelagem de TKE foi prejudicado pela complexidade do escoamento tridimensional, a presença das fontes de calor e pelas simplificações impostas pelos modelos de viscosidade turbulenta. WANG *et* CHEN (2009) e LOOMANS (1998) mencionam que estas simplificações restringem o desempenho destes modelos nesta classe de problemas. Entretanto, a ASHRAE (2013b) menciona que os parâmetros de 2ª ordem, como a energia cinética turbulenta, geralmente apresentam maiores incertezas do que os de 1ª ordem, tanto nos resultados das simulações, quanto nos dados experimentais, de modo que a busca por uma perfeita concordância para estes parâmetros é desnecessária.

e) Conclusão

Os casos simulados foram propostos pela ASHRAE (2009) para desafiar os códigos CFD na simulação das complexas características do escoamento transicional em ambientes internos, com a presença de jatos de insuflação, escoamento induzido, separações e plumas térmicas oriundas da dissipação de calor. Usando-se a metodologia apresentada na seção 5.4, proposta pela ASHRAE (2009) para graduar o desempenho de modelagem, podemos considerar que os códigos CFX e FLUENT são, no mínimo, marginalmente aceitáveis para simulação do escoamento transicional do ar em ambientes internos. Para o código CONTAM/CFD-0, o desempenho na simulação dos perfis de velocidade também se mostrou marginalmente aceitável, mas outros testes complementares se tornam necessários, em função da ausência de dados de saída sobre TKE. Os resultados dos próximos casos de validação, para o *benchmark* de laboratório e hospitalar, baseados no transporte de contaminantes, produziram resultados complementares para embasar a validação do CONTAM/CFD-0 e dos demais códigos avaliados.

5.6.2. SIMULAÇÃO DO BENCHMARK DE LABORATÓRIO

a) Teste de Convergência de Malha

Para o teste de convergência de malha, três variáveis do escoamento foram selecionadas: eficácia de ventilação média no eixo P1 ($\overline{\xi_{p1}}$); velocidade na zona de influência da exaustão ($U_{inf,GE}$, ponto situado no eixo normal à grelha de exaustão, a uma distância de 0,3m a montante da mesma); velocidade na zona de influência da indução do difusor ($U_{asp,dif}$, ponto situado no eixo normal ao difusor, a uma distância de 0,3m abaixo do mesmo); A figura a seguir apresenta uma seção horizontal do modelo, mostrando o posicionamento dos elementos associados:

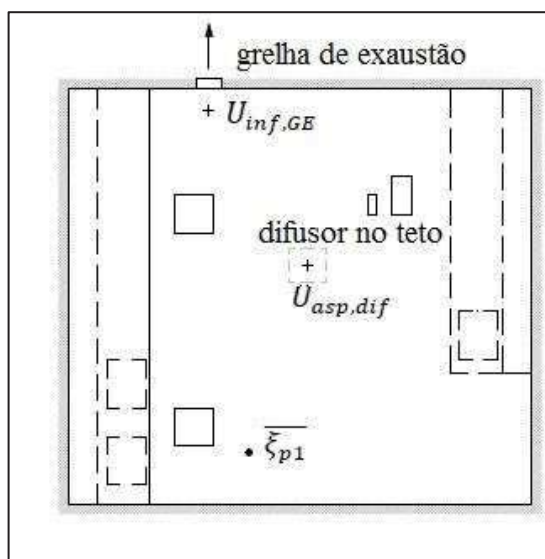


Figura 5.12 Posição dos elementos envolvidos no teste de convergência de malha, para o benchmark de laboratório

As malhas adotadas nas simulações com o código CFX compreendem um número aproximado de 3.900.000, 1.800.000 e 900.000 elementos tetraédricos. As malhas adotadas nas simulações com o código CONTAM/CFD-0 compreendem um número aproximado de 3.600.000, 800.000 e 160.000 elementos hexagonais. Estas malhas foram selecionadas para realização do teste do índice de convergência de malha, GCI (*grid convergence index*), conforme a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK et al (1993). Os resultados do teste GCI (ROACHE,1996), apresentados no formato sugerido por CELIK et al (1993), para a malha gerada pela ANSYS (códigos CFX e FLUENT) encontram-se na tabela a seguir:

**Tabela 5.11 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS-
benchmark laboratório**

Número de Nós N_1, N_2, N_3	3.900.000, 1.800.000, 900.000		
Quantidade avaliada	$\bar{\xi}_{p1}$	$U_{inf,GE}$	$U_{asp,dif}$
r_{21}	1,29	1,14	1,58
r_{32}	1,26	1,23	1,11
ϕ_1	0,69	0,4856	0,1950
ϕ_2	0,70	0,4874	0,1779
ϕ_3	0,79	0,5055	0,1562
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	0,689	0,4850	0,1954
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	1,4 %	0,4 %	8,8 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	0,1 %	0,1 %	0,2 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	0,2 %	0,2 %	0,3 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	0,689	0,4850	0,1954
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	12,9 %	3,7 %	12,2 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	1,6 %	0,5 %	9,0 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	1,9 %	0,6 %	12,3 %

Os resultados deste teste, para as malhas envolvidas na simulação com o código CONTAM/CFD-0, encontram-se na tabela a seguir:

Tabela 5.12 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam-benchmark laboratório

Número de elementos N_1, N_2, N_3	3.600.000, 800.000, 160.000		
Quantidade avaliada	$\bar{\xi}_{p1}$	$U_{inf,GE}$	$U_{asp,dif}$
r_{21}	2,77	2,00	1,65
r_{32}	1,46	1,65	1,71
ϕ_1	1,01	0,4722	0,1423
ϕ_2	0,95	0,4973	0,1476
ϕ_3	0,97	0,1352	0,1630
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	1,07	0,4715	0,1390
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	6,5 %	5,3 %	3,7 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	5,3 %	0,1 %	2,4 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	6,9 %	0,2 %	2,9 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	0,88	0,5257	0,1391
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	2,4 %	72,8 %	10,4 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	7,5 %	5,4 %	6,1 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	8,8 %	7,1 %	7,2 %

Assim como no caso anterior, o erro numérico associado à malha gerada pelo código CONTAM-CFD/0 é superior ao da malha gerada pelo código CFX. Além da deficiência causada pela geração manual da malha, a complexidade da geometria deste caso apresenta regiões onde esta característica dificulta a tarefa de refinamento de malha. A malha mais fina foi selecionada para uso com todos os códigos, em função do menor erro numérico associado, tal como verificado pelo método GCI.

b) Resultados das Simulações – eficácia de ventilação

Os resultados das simulações para concentração de contaminantes (\bar{C}_p), eficácia de ventilação associada ($\bar{\xi}_p$), e comparação com os dados experimentais correspondentes encontram-se nas tabelas a seguir:

**Tabela 5.13 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX RNG ke-
benchmark laboratório**

Eixo	$\overline{C_p}$ (ppm)			$\overline{\xi_p}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
P1	0,23	0,26	13%	0,77	0,69	-10%
P6	0,28	0,23	-18%	0,63	0,78	24%
P8	0,39	0,53	36 %	0,45	0,34	-24%
GE	0,18	0,18	0 %	-	-	-
Diferença absoluta média	16,8 %			19,3%		
Grau atribuído	3,0			3,0		

**Tabela 5.14 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX SST kw-
benchmark laboratório**

Eixo	$\overline{C_p}$ (ppm)			$\overline{\xi_p}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
P1	0,23	0,26	13%	0,77	0,69	-10%
P6	0,28	0,21	25%	0,63	0,84	33%
P8	0,39	0,45	15%	0,45	0,40	-11%
GE	0,18	0,18	0%	-	-	-
Diferença absoluta média	13,3 %			13,5%		
Grau atribuído	3,3			3,0		

**Tabela 5.15 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código FLUENT- benchmark
laboratório**

Eixo	$\overline{C_p}$ (ppm)			$\overline{\xi_p}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
P1	0,23	0,19	-17%	0,77	1,01	31%
P6	0,28	0,33	18%	0,63	0,59	-6%
P8	0,39	0,48	23%	0,45	0,40	-11%
GE	0,18	0,20	11%	-	-	-
Diferença absoluta média	17,3 %			16,0%		
Grau atribuído	3,0			3,0		

Tabela 5.16 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CONTAM/CFD-0-benchmark laboratório

Eixo	\bar{C}_p (ppm)			$\bar{\xi}_p$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
P1	0,23	0,19	-17%	0,77	1,01	31%
P6	0,28	0,23	-18%	0,63	0,86	37%
P8	0,39	0,41	5%	0,45	0,47	4%
GE	0,18	0,19	6%	-	-	-
Diferença absoluta média	11,5 %			24,0%		
Grau atribuído	3,5			2,7		

A concentração está apresentada na forma de concentração volumétrica, em partes por milhão (ppm), porque esta é a forma apresentada no benchmark de JIN *et al* (2012).

c) Análise dos Resultados

Apesar do modo de ventilação por mistura, os dados experimentais medidos por JIN *et al* (2012) demonstram considerável variação espacial na concentração de contaminantes. A maior concentração ocorre no eixo P8, em função de sua proximidade à fonte de contaminantes. A concentração nesta região é cerca de 2 vezes maior do que na exaustão, o que produz uma baixa eficácia de ventilação. As simulações obtidas com os três códigos reproduzem esta situação. Os resultados demonstram que a avaliação pela eficácia de ventilação é sensível às pequenas variações da concentração nos pontos envolvidos (exaustão e ponto de interesse). Esta situação é acentuada nos eixos onde a diferença entre a sua concentração e a da exaustão não é elevada, como no eixo P1. Para o código CONTAM-CFD/0, por exemplo, uma diferença de 17% na previsão da concentração média em P1, e de 6% nesta previsão para a exaustão produz uma diferença de 31% na previsão da eficácia de ventilação associada. Cabe notar que este código, mesmo com as limitações associadas à geração manual de malha, modelagem de turbulência e do difusor, apresenta um bom desempenho neste caso. Usando-se a metodologia de WANG (2007) discutida na seção anterior, estima-se que o número de Arquimedes para o caso em questão apresenta ordem de grandeza igual a 1, o que agrega complexidade à simulação, em função da influência da dissipação de calor no

campo de escoamento resultante. Verifica-se que o uso das simulações numéricas com a utilização destes códigos produz resultados que são mais apropriados do que aqueles advindos da premissa de “mistura perfeita” ($\bar{\xi}_p = 1$). Como exemplo, o uso desta premissa subestimaria em 50% a dose de exposição à que um pesquisador estaria submetido na região do eixo P8, na eventualidade de um acidente como aquele modelado no *benchmark*.

d) Conclusão

Usando-se a metodologia apresentada na seção 5.4, proposta pela ASHRAE (2009) para graduar o desempenho de modelagem, podemos considerar que os três códigos, CFX, FLUENT e CONTAM-CFD/0, são aceitáveis para simulação do transporte de contaminantes em ambientes internos com ventilação por mistura. Cabe ressaltar a complexidade do problema associado, que busca representar o escoamento tridimensional do ar em laboratórios, dotados de mobiliário e equipamentos com dissipação de calor.

5.6.3. SIMULAÇÃO DO BENCHMARK HOSPITALAR

a) Teste de Convergência de Malha

Para o teste de convergência de malha, quatro variáveis do escoamento foram selecionadas: eficácia de ventilação no ponto P1, altura da zona de respiração ($\bar{\xi}_{p1,h}$, $h = 1,60m$); velocidade na zona de influência da exaustão ($U_{inf,GE}$, ponto situado no eixo normal à grelha de exaustão, a uma distância de 0,3m a montante da mesma); velocidade na zona de insuflação do difusor ($U_{ins,dif}$, ponto situado no eixo normal ao difusor, a uma distância de 0,8m a jusante do mesmo); Velocidade na zona de ocupação, ponto P1, $h = 0,8m$. A figura a seguir apresenta uma seção horizontal do modelo, mostrando o posicionamento dos elementos associados:

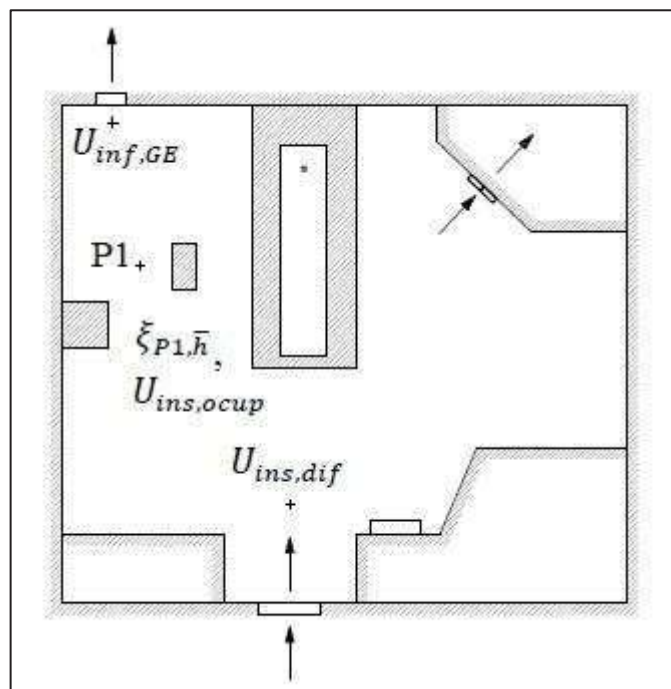


Figura 5.13 Posição dos elementos envolvidos no teste de convergência de malha, para o benchmark hospitalar

As malhas adotadas nas simulações com o código CFX compreendem um número aproximado de 2.500.000, 1.100.000 e 640.000 elementos tetraédricos. As malhas adotadas nas simulações com o código CONTAM/CFD-0 compreendem um número aproximado de 4.500.000, 1.500.000 e 200.000 elementos hexagonais. Estas malhas foram seleccionadas para o teste do índice de convergência de malha, GCI (*grid convergence index*), conforme a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK et al (1993). Os resultados do teste GCI (ROACHE,1996), apresentados no formato sugerido por CELIK et al (1993), para a malha gerada pela ANSYS (códigos CFX e FLUENT) encontram-se na tabela a seguir:

**Tabela 5.17 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI- malha ANSYS-
benchmark hospitalar**

Número de elementos N_1, N_2, N_3	2.500.000, 1.100.000, 640.000			
Quantidade avaliada	$\xi_{P1,\bar{h}}$	$U_{inf,GE}$	$U_{ins,dif}$	$U_{ins,ocup}$
r_{21}	1,33	1,31	1,26	1,40
r_{32}	1,22	1,18	1,17	1,29
ϕ_1	0,4810	0,0675	0,1343	0,0287
ϕ_2	0,4118	0,0640	0,1350	0,0330
ϕ_3	0,2107	0,0573	0,1360	0,0094
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	0,4954	0,0685	0,1338	0,0281
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	14,4 %	5,2 %	0,5 %	15,0 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	2,9 %	1,4 %	0,3 %	2,0 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	3,8 %	1,8 %	0,4 %	2,5 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	0,4955	0,0685	0,1338	0,0387
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	48,8 %	10,9 %	0,7 %	71,7 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	16,9 %	6,6 %	0,9 %	14,7 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	25,4 %	8,9 %	1,1 %	21,6 %

Os resultados deste teste, para as malhas envolvidas na simulação com o código CONTAM/CFD-0, encontram-se na tabela a seguir:

Tabela 5.18 Resultados do Estudo de Convergência de Malha pelo Método CGI-CFD0/Contam-benchmark hospitalar

Número de elementos N_1, N_2, N_3	4.500.000, 1.500.000, 200.000			
Quantidade avaliada	$\xi_{p1,\bar{h}}$	$U_{inf,GE}$	$U_{ins,dif}$	$U_{ins,ocup}$
r_{21}	1,81	1,54	1,59	1,71
r_{32}	1,72	1,26	1,71	1,54
ϕ_1	2,947	0,0733	0,1104	0,0321
ϕ_2	1,315	0,0561	0,0936	0,0392
ϕ_3	0,847	0,0928	0,1446	0,0575
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	3,754	0,0816	0,1202	0,0294
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	55,4 %	23,5 %	15,2 %	22,1 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	21,5 %	10,2 %	8,2 %	9,1 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	34,2 %	14,3 %	11,1 %	10,4 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	1,582	0,0118	0,0699	0,0294
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	35,6 %	65,4 %	54,5 %	46,6 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	16,9 %	377,1 %	33,9 %	33,3 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	25,4 %	98,8 %	31,6 %	31,2 %

Os resultados do teste de convergência do código CONTAM-CFD/0 apresentam algumas inconsistências, principalmente para o erro associado à eficácia de ventilação ($\overline{\xi_{p1}}$). A inexistência de um algoritmo para refinamento automático de malha pode ter contribuído para esta situação: A eficácia é um parâmetro que é derivado de variáveis de campo calculadas em diferentes regiões espaciais, a concentração na exaustão e no ponto analisado. A geração manual de malha deste código dificulta a garantia da proporcionalidade de refinamento nestas duas regiões. A geometria deste caso é irregular, o que dificulta a sua modelagem no gerador de malhas manual do código CONTAM-CFD/0, e o resultado é refletido nos elevados erros numéricos associados. Independentemente da acurácia na precisão deste erro numérico, para este código, pode-se verificar, pelos dados da tabela anterior, que a malha mais fina produz uma solução que pode ser considerada independente de malha, e por isto, esta malha foi selecionada.

Para o caso do código CFX, a malha mais fina também foi selecionada, em função do menor erro numérico associado, tal como verificado pelo método GCI.

b) Resultados das Simulações –campos de velocidade

Os resultados das simulações dos perfis de velocidade para alguns eixos representativos do campo de velocidades, bem como a comparação com os dados experimentais correspondentes encontram-se na figura a seguir:

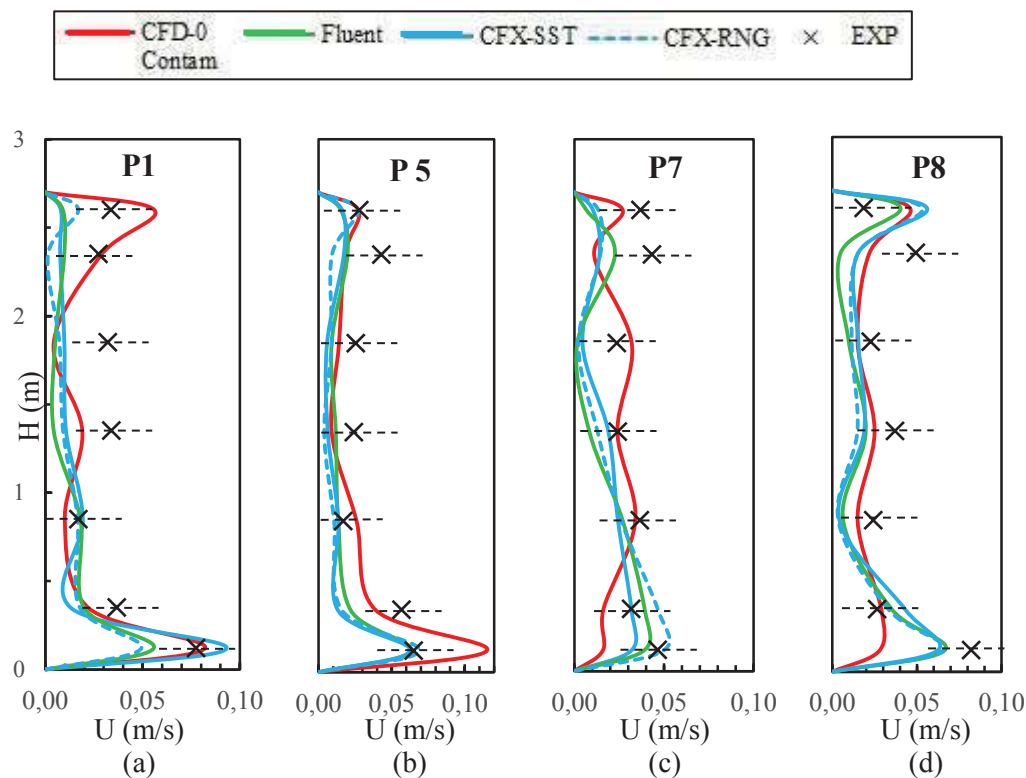


Figura 5.14 Resultados dos perfis de velocidade para alguns eixos selecionados da simulação do benchmark hospitalar. (a) P1, (b) P5, (c) P7, (d) P8

Os valores detalhados dos resultados deste teste encontram-se no Anexo G. Os valores das diferenças absolutas médias em cada eixo estão resumidos na tabela a seguir.

**Tabela 5.19 Diferença absoluta média entre simulação e experimento – campo de velocidades –
Caso 3 do benchmark da ASHRAE**

Eixo	CFD-0/ CONTAM	CFX (SST- $\kappa\omega$)	CFX (RNG- $\kappa\epsilon$)	FLUENT (RNG- $\kappa\epsilon$)
P1	12,4 %	21,9 %	12,8 %	28,6 %
P3	15,1 %	13,2 %	11,3 %	14,8 %
P5	22,5 %	25,1 %	22,8 %	10,2 %
P7	23,4 %	11,1 %	23,3 %	13,6 %
P8	44,7 %	42,3 %	44,9 %	15,0 %
Média (sobre todos eixos)	23,6 %	22,7 %	23,0 %	16,4 %
Grau atribuído (de acordo com metodologia da ASHRAE)	3,1	3,0	3,0	3,1

c) Resultados das Simulações –eficácia de ventilação

Os resultados das simulações da concentração de contaminantes ($\overline{C_p}$), eficácia de ventilação associada ($\overline{\xi_p}$), e comparação com os dados experimentais correspondentes encontram-se nas tabelas a seguir:

Tabela 5.20 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX-SST kw-benchmark hospitalar

Eixo	$C_{p,\bar{h}}$ (ppm)			$\xi_{p,\bar{h}}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
TG1	0,45	0,84	84%	2,13	1,14	-46%
TG2	0,53	0,48	-9%	1,81	1,98	9%
TG3	0,59	0,69	17%	1,63	1,38	-15%
TG5	1,27	1,40	10%	0,76	0,68	-10%
EX	0,96	0,95	-1%	-	-	-
Diferença absoluta média	24,2 %			20,0%		
Grau atribuído	3,0			3,0		

**Tabela 5.21 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CFX-RNG ke-
benchmark hospitalar**

Eixo	$C_{P,\bar{h}}$ (ppm)			$\xi_{P,\bar{h}}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
TG1	0,45	0,57	27%	2,13	1,67	-22%
TG2	0,53	0,63	19%	1,81	1,51	-17%
TG3	0,59	0,93	58%	1,63	1,02	-37%
TG5	1,27	0,99	-22%	0,76	0,96	27%
EX	0,96	0,95	-1%	-	-	-
Diferença absoluta média	25,4 %			25,8%		
Grau atribuído	2,8			2,8		

**Tabela 5.22 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código FLUENT- benchmark
hospitalar**

Eixo	$C_{P,\bar{h}}$ (ppm)			$\xi_{P,\bar{h}}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
TG1	0,45	0,56	24%	2,13	1,70	-20%
TG2	0,53	0,98	85%	1,81	0,97	-46%
TG3	0,59	0,85	44%	1,63	1,12	-31%
TG5	1,27	2,00	57%	0,76	0,48	-37%
EX	0,96	0,95	-1%	-	-	-
Diferença absoluta média	42,2 %			33,5%		
Grau atribuído	2,2			2,3		

**Tabela 5.23 Resultados das Simulações de Eficácia de Ventilação do Código CONTAM/CFD-0-
benchmark hospitalar**

Eixo	$C_{P,\bar{h}}$ (ppm)			$\xi_{P,\bar{h}}$		
	Exp.	Sim.	Dif.	Exp.	Sim.	Dif.
TG1	0,45	0,37	-18%	2,13	2,57	20%
TG2	0,53	0,50	-6%	1,81	1,90	5%
TG3	0,59	0,68	15%	1,63	1,40	-14%
TG5	1,27	0,77	-39%	0,76	1,23	63%
EX	0,96	0,95	-1%	-	-	-
Diferença absoluta média	15,8 %			25,5%		
Grau atribuído	3,2			2,8		

d) Análise dos Resultados

O desempenho na simulação dos perfis de velocidade é relativamente similar, para todos os códigos testados. Para os eixos P1 e P5, a montante do paciente, a velocidade é sensivelmente maior junto ao piso, em função da influência da insuflação do modo de ventilação por deslocamento positivo (DV). Pela análise dos perfis de velocidade, observa-se que as simulações reproduzem esta situação. O eixo P8 se localiza numa região do quarto sem a presença de fontes de calor (próxima ao banheiro), de modo que o perfil ainda apresenta uma maior velocidade junto ao piso. Os resultados das simulações também reproduzem esta característica, com exceção do código CONTAM-CFD/0. O eixo P7 se localiza numa região entre o profissional de saúde e o paciente (fontes de calor), e o perfil de velocidade é mais homogêneo. Os perfis simulados também reproduzem esta característica. O valor médio das velocidades medidas por YIN *et al* (2009) é $0,04 \text{ m.s}^{-1}$, um valor relativamente baixo, considerando-se a ventilação mecânica de ambientes. Esta situação é resultante do uso da técnica de ventilação por DV, e a velocidade de insuflação (contorno) utilizada no benchmark já é consideravelmente baixa, de $0,17 \text{ m.s}^{-1}$. A diferença entre os valores simulados e dados experimentais geralmente foi menor do que a precisão do anemômetro utilizado, e esta situação se reflete no bom desempenho dos códigos na simulação dos perfis de velocidade.

As simulações do transporte de contaminantes não apresentaram um desempenho tão bom quanto as simulações de velocidade. Os resultados obtidos pelo código CONTAM-CFD/0 apresentam uma menor diferença em relação aos dados experimentais, mas esta situação é prejudicada pelo elevado erro numérico associado às limitações impostas pelo gerador de malhas. Os dados experimentais demonstram uma característica do modo DV, que é a obtenção de altas eficácias de ventilação na zona respirável, pela eficaz advecção dos contaminantes para as regiões junto ao teto (fora da zona de ocupação), através da ação do empuxo térmico das fontes de calor. Usando-se a metodologia de WANG (2007) apresentada nas seções anteriores, estima-se que o número de Arquimedes para o caso em questão apresenta ordem de grandeza igual a 10^2 , de modo que se verifica que as forças de empuxo térmico são muito maiores do que as forças inerciais. LOOMANS (1998) menciona que a modelagem da transferência

de calor pela aplicação das funções de parede (*wall functions*) se mostra deficitária, para a modelagem destes casos ($Ar \gg 1$). Esta deficiência superestima os gradientes de temperatura, o que causa a subestimação da vazão das plumas térmicas convectivas, com efeitos na redução da eficácia de ventilação. A análise dos resultados das simulações permite verificar que a eficácia de ventilação simulada foi subestimada em grande parte dos pontos avaliados, pelos códigos CFX e FLUENT, que foram modelados com as funções de parede. Estes códigos também permitem a modelagem da transferência de calor na parede pela especificação de um coeficiente de transferência de calor por convecção (h_w). LOOMANS (1998) menciona que esta abordagem é preferencial nestes casos, mas depende da aplicação de valores oriundos de medições experimentais em problemas similares.

e) Conclusão

Usando-se a metodologia apresentada na seção 5.4, proposta pela ASHRAE (2009) para graduar o desempenho de modelagem, podemos considerar que os códigos CFX, FLUENT e CONTAM-CFD/0 são, no mínimo, marginalmente aceitáveis para simulação do transporte de contaminantes em ambientes internos com ventilação por deslocamento positivo. Espera-se que melhores resultados sejam obtidos com a modelagem do fluxo de calor nas paredes pela especificação do coeficiente de transferência de calor por convecção, em vez do uso das funções de parede. Cabe ressaltar a complexidade do problema associado, que desafia os códigos em uma situação limite, principalmente em função das baixas velocidades, alto número de Arquimedes e complexa geometria.

5.7. CONCLUSÕES DAS VALIDAÇÕES E SELEÇÃO DO CÓDIGO

As validações precedentes envolveram a aplicação dos códigos testados na modelagem de problemas complexos da classe do escoamento do ar em ambientes internos. Os *benchmarks* envolvidos foram planejados de modo a desafiar os códigos na simulação das complexas características do escoamento tridimensional do ar em regime transicional, com a presença de jatos de insuflação, indução associada, separação e a presença de plumas térmicas convectivas. Também aplicaram geometrias de considerável complexidade, planejadas de modo a representar as características de

ambientes reais, como laboratórios de pesquisa e quartos hospitalares. Apresentaram características inerentes aos modos de ventilação por mistura (MV), e por deslocamento positivo (DV). A avaliação do desempenho destes códigos foi realizada utilizando-se a metodologia desenvolvida pela ASHRAE (2009), especificamente para estas aplicações. A aplicação desta metodologia aos resultados obtidos permite classificar o desempenho dos códigos, com a modelagem apresentada neste capítulo, como:

- aceitável, para a simulação do escoamento do ar e transporte de contaminantes em ambientes internos dotados de ventilação por mistura (MV);
- marginalmente aceitável, para a simulação do escoamento do ar e transporte de contaminantes em ambientes internos dotados de ventilação por deslocamento positivo (DV);

Para o caso da simulação do modo de ventilação por DV, verificou-se que a aplicação da modelagem com uso de funções de parede (*wall functions*) prejudicou a simulação da transferência de calor nas paredes, impactando na simulação da advecção de contaminantes pela ação das plumas térmicas, tal como alertado por LOOMANS (1998). Como este termo de transporte é o principal responsável pelo alcance de elevados valores de eficácia de ventilação, sua modelagem é essencial. Sugere-se que trabalhos e estudos futuros envolvendo este modo (DV) utilizem a modelagem da transferência de calor nas paredes através da especificação do coeficiente de transferência de calor por convecção (h_w).

Cabe ressaltar que os casos modelados apresentam complexidade inerente ao escoamento tridimensional, com a presença de fontes de calor, em geometrias assimétricas e não triviais. Apesar das limitações associadas ao uso da modelagem de viscosidade turbulenta, verifica-se que a aplicação destes códigos promove resultados que são mais apropriados do que aqueles advindos da premissa de “mistura perfeita” ($\bar{\xi}_p = 1$). Para plenitude desta análise, cabe destacar que os resultados também dependem da habilidade e experiência do operador, e espera-se que melhores resultados sejam obtidos por operadores com maior experiência.

Estas análises produzem a primeira contribuição desta tese, referente à validação do código CONTAM-CFD/0 para os *benchmarks* da ASHRAE (2009), voltado à

simulação do escoamento em regime transicional com fontes de calor, de JIN *et al* (2012), voltado à simulação do transporte de contaminantes em laboratórios ventilados por MV, e de YIN *et al* (2009), voltado à simulação do transporte de contaminantes em quartos hospitalares ventilados por DV. Trata-se de informação que pode ser útil e relevante aos usuários deste código, desenvolvido pelo NIST para a classe de problemas do transporte de contaminantes pelo ar. Como contribuição ao desenvolvimento deste código, sugere-se que as novas versões envolvam algoritmos para geração automática de malhas não-estruturadas, novos modelos de turbulência aplicáveis à esta classe de problemas (RNG ke e SST kw), e a possibilidade de modelagem dos difusores de ar pelo *momentum method*.

O código FLUENT (versão 14.5) da ANSYS foi selecionado para a condução das demais simulações envolvidas nesta pesquisa. Esta seleção é justificada porque as próximas simulações estão relacionadas à classe dos problemas de escoamento do ar interno à laboratórios com ventilação por mistura (MV), e este código apresentou desempenho aceitável na simulação dos *benchmarks* associados da ASHRAE (2009) e de laboratório (JIN *et al*, 2012). Sua seleção em relação ao CFX se deve em função do FLUENT já ser um código consagrado para uso em pesquisas similares, como no projeto de pesquisa RP-1458 da ASHRAE (CHEN *et al*, 2014), sobre o processo de transporte de contaminantes entre ocupantes de ambientes internos. Entretanto, considera-se, face aos resultados das validações deste capítulo, que o ANSYS CFX também seria apropriado para uso nestas simulações.

6. ESPECIFICAÇÃO DO PROBLEMA E METODOLOGIA

6.1. ESPECIFICAÇÃO DO PROBLEMA

Um laboratório foi modelado de modo a representar as características gerais de um laboratório com nível de biossegurança (BSL), onde procedimentos com potencial de aerossolização, envolvendo amostras contendo agentes patogênicos, são realizados. Foi adotada a premissa de que estes procedimentos são conduzidos no interior de uma cabine de segurança biológica (BSC), como recomendado pelos protocolos administrativos para os laboratórios BSL-2 e BSL-3 (WHO, 2004; CDC *et* NIH, 2007). Os laboratórios BSL-4 foram excluídos deste estudo, considerando-se que são extremamente restritos e específicos, com poucas unidades operacionais instaladas nos EUA (DI BERARDINIS *et al*, 2013). Como a geração dos contaminantes está restrita ao interior das BSCs, a sua capacidade de contenção está relacionada com a minimização da aerodispersão destes contaminantes para o laboratório. O principal objetivo desta tese foi de avaliar a sensibilidade desta capacidade de contenção da BSC a diferentes padrões de escoamento do ar, resultantes de variações nas condições de contorno impostas. Conforme descrito na seção 1.2, as condições de contorno selecionadas para análise foram: intensidade turbulenta associada ao fluxo de escoamento unidirecional vertical (*downflow*) da BSC; carga térmica; vazão de descarga da BSC, que governa a velocidade de entrada de ar pela janela (*inflow*) da cabine; Vazão de ar movimentada no laboratório, que governa a taxa de renovação de ar.

Conforme mencionado na seção 1.2, a capacidade de contenção destes contaminantes foi quantificada pelo uso de fatores específicos, que serão definidos nas próximas seções. Diversos cenários, com diferentes condições de contorno, foram

especificados, para a realização dos testes de sensibilidade de contenção. A simulação numérica, através da dinâmica de fluidos computacional (CFD, *computational fluid dynamics*) foi utilizada para quantificar o desempenho de contenção de cada cenário. Os resultados foram utilizados para a realização de análises comparativas.

6.1.1. ESPECIFICAÇÃO DO LABORATÓRIO MODELADO

A configuração do laboratório modelado é mostrada na figura 6.1, e apresenta um arranjo similar ao laboratório de menor escala utilizado por MEMARZADEH (1996) em suas simulações. Apresenta dimensões de 6,6m (comprimento) x 3,4m (largura) e 3,1m (altura). A configuração de menor escala foi selecionada para melhor representar um ambiente de contenção, destinado a procedimentos de maior risco, e restrito a poucos usuários.

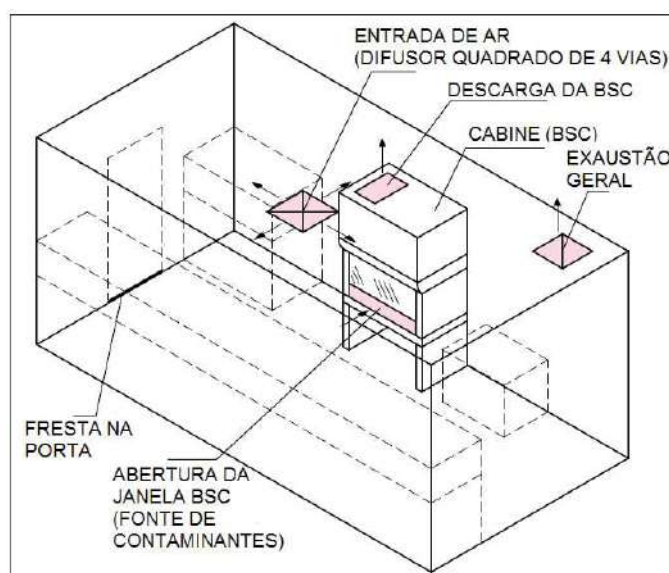


Figura 6.1 Configuração geral do laboratório modelado

O laboratório é equipado com uma cabine de segurança biológica (BSC), com largura nominal de 1,2m, e bancadas de trabalho destinadas aos demais equipamentos laboratoriais. Estes foram considerados como caixas retangulares, já que esta é a forma mais comum de freezers, incubadoras, centrífugas e da maioria dos equipamentos aplicáveis. Para efeito de simplificação, os equipamentos foram modelados como uma caixa contínua ao longo das bancadas, com altura de 0,5m. O laboratório foi modelado sem a presença de um cientista defronte à BSC. Esta decisão foi baseada nas conclusões

dos testes similares conduzidos por MEMARZADEH (1996) para o caso das capelas de exaustão química. MEMARZADEH (1996) conclui que, caso haja recursos computacionais limitados para a análise comparativa de diversos cenários, a modelagem sem a presença do manequim produz um resultado suficientemente representativo do desempenho de cada cenário.

O laboratório é ventilado através do modo de ventilação por mistura (MV), provido através de um difusor quadrado de 4 vias instalado no teto, dimensões nominais 0,6m x 0,6m (24" x 24"), responsável pela insuflação de ar. A exaustão geral se dá através de uma grelha instalada no teto, com dimensões nominais de 0,5m x 0,5m (20" x 20"). Estas características foram dimensionadas para acomodar uma vazão máxima de insuflação compatível com uma taxa de 17 ACH (renovações por hora), dado que a ordem de grandeza da taxa de renovação em laboratórios é 10^1 (DELUGA, 1998). Esta vazão também é consistente para atendimento de uma capacidade mínima de resfriamento de 86 W.m^{-2} , que é o valor determinado pelo NIH (2016), uma instituição de referência, para dimensionamento de seus laboratórios. O modo de ventilação por mistura (MV) foi selecionado porque é uma das estratégias de ventilação mais comumente aplicadas em ambientes com programas de controle de infecção (ASHRAE, 2013a), e presente como solução na maioria dos laboratórios (MEMARZADEH, 2009). A vazão de exaustão geral foi dimensionada com uma diferença (*offset*) em relação à vazão de insuflação, com objetivo da manutenção do laboratório em leve pressurização negativa, relativa aos ambientes adjacentes. A diferença aplicada foi de 47 L.s^{-1} , que é o valor recomendado pelo NIH (2016) para operação de seus laboratórios. Esta vazão de *offset* foi modelada como uma infiltração através da fresta da porta, localizada junto ao piso. Com relação à carga térmica, foi considerado que a premissa de contenção promove a locação destes laboratórios no núcleo da edificação, sem contato com as paredes externas do envelope. Esta hipótese permite que as paredes sejam modeladas como adiabáticas. Neste caso, a modelagem adotou a consideração de que totalidade da carga térmica é oriunda da dissipação de calor pelos equipamentos laboratoriais. Esta configuração caracteriza o laboratório base, cujos dados operacionais estão reunidos na tabela a seguir:

Tabela 6.1 Dados operacionais do laboratório base modelado para as simulações

Dados Gerais	valor
ACH (<i>Air changes per hour</i> , h^{-1})	17
Vazão de insuflação de ar ($L \cdot s^{-1}$)	323
Vazão de infiltração pela porta ($L \cdot s^{-1}$)	47
Vazão de exaustão geral ($L \cdot s^{-1}$)	370
Carga térmica ($W \cdot m^{-2}$)	86
Temperatura de insuflação ($^{\circ}C$)	17,0
Temperatura média ambiente ($^{\circ}C$)	22,0

6.2. MODELAGEM DA CABINE DE SEGURANÇA BIOLÓGICA

A cabine de segurança biológica (BSC) associada apresenta classe II-A2 (NSF, 2009), largura nominal de 1,2m (4 ft). Foi modelada em função de uma cabine real, desta mesma classe e dimensões, que se encontra em operação em um laboratório da FIOCRUZ, no Rio de Janeiro. Duas metodologias de validação foram aplicadas: A primeira envolveu medições de campo para assegurar que os parâmetros operacionais principais (vazões de downflow, inflow e descarga) estejam de acordo com as premissas da norma internacional NSF-49 (NSF, 2009); A segunda validação envolveu a simulação numérica do campo de velocidades da BSC.

6.2.1. MEDIÇÕES DE CAMPO PARA CARACTERIZAÇÃO DAS CONDIÇÕES OPERACIONAIS DA CABINE DE SEGURANÇA BIOLÓGICA

Esta seção tem por objetivo apresentar os resultados das medições realizadas na cabine de segurança biológica (BSC) utilizada nesta tese. Trata-se de uma cabine classe II-A2 (de acordo com classificação NSF-49), com largura nominal de 1,2m, instalada na Plataforma tecnológica DATT- Sala 303, do Pavilhão Leônidas Deane da Fiocruz, localizada no Rio de Janeiro – RJ. As figuras a seguir mostram o arranjo geral da sala, com o posicionamento da cabine em questão.

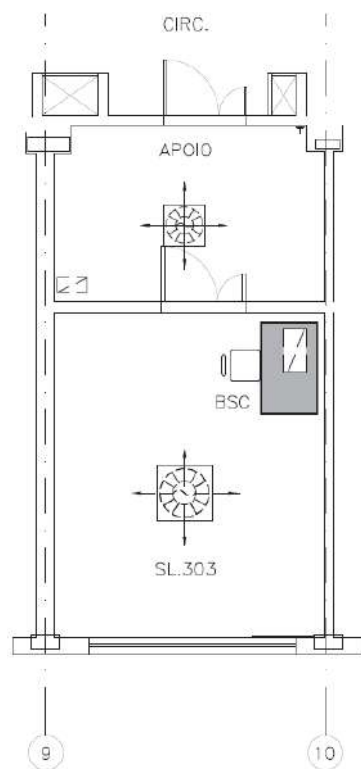


Figura 6.2 Arranjo Geral da Sala 303, com o posicionamento da BSC



Figura 6.3 BSC instalada na Sala 303

As medições foram realizadas em 30 de setembro de 2016, e contaram com o apoio da equipe do departamento de Metrologia da Fiocruz, que é responsável pela certificação das cabines da instituição. A sala é climatizada continuamente, e a cabine foi reservada para uso exclusivo destas medições. A cabine foi acionada previamente ao início das medições, com intervalo de tempo de 1 hora, de modo a garantir um regime operacional aproximadamente constante.

Os dados técnicos da cabine em questão estão mostrados na tabela a seguir:

Tabela 6.2 Dados Técnicos da Cabine de Segurança Biológica Utilizada nas Medições Experimentais

Dado técnico	especificação
Fabricante	TROX
Modelo	TLF-A1-2.3-12V-H3-P2
Número de série	210143-1-1-1
Classificação (cfe. NSF-49)	Classe II-A2
Data da última certificação	10/03/2016

Inicialmente, foram realizadas medições dos parâmetros operacionais básicos (vazões de *inflow*³ e *downflow*⁴), e verificação da conformidade da velocidade de *inflow* com o padrão determinado pela NSF-49 (2009). Esta norma determina que, para esta classe de cabines, a velocidade mínima de *inflow* deve ser de 0,51 m/s (NSF, 2009). A norma estabelece, em seu anexo A, dois métodos para esta medição. O método direto preconiza o uso de um medidor de vazão para determinação da velocidade de *inflow*. O método alternativo utiliza medições de velocidade em múltiplos pontos, com um anemômetro, e o uso da média destas velocidades para caracterização da velocidade de *inflow*. Foi adotado o método alternativo de medição, em função da instrumentação

³ Fluxo de ar através da abertura de acesso à área de trabalho (NSF, 2009);

⁴ Fluxo de ar, no interior da cabine, proveniente dos filtros HEPA, descendo em padrão unidirecional em direção à área de trabalho (NSF, 2009);

disponível. Este método pode ser utilizado no filtro de descarga de exaustão ou diretamente na abertura da área de trabalho. A vazão de exaustão governa a velocidade de *inflow*, já que este fluxo se estabelece para a garantia do balanço de massa (continuidade) no interior da área de trabalho. Para efeito de comparação, foram realizadas duas medições diferentes, uma no filtro de descarga de exaustão e a outra diretamente na abertura da área de trabalho.

Para a medição da vazão de exaustão, foi adotado um método indireto, calculando-se a vazão de exaustão a partir da velocidade média de descarga no filtro do equipamento. Para esta tarefa, foi utilizado um anemômetro de hélice, digital, fabricante TSI-ALNOR, modelo LCA-501, precisão de $0,2 \text{ m.s}^{-1}$. Foram realizadas medições da velocidade de descarga em diversos planos do filtro de exaustão, conforme figura a seguir.

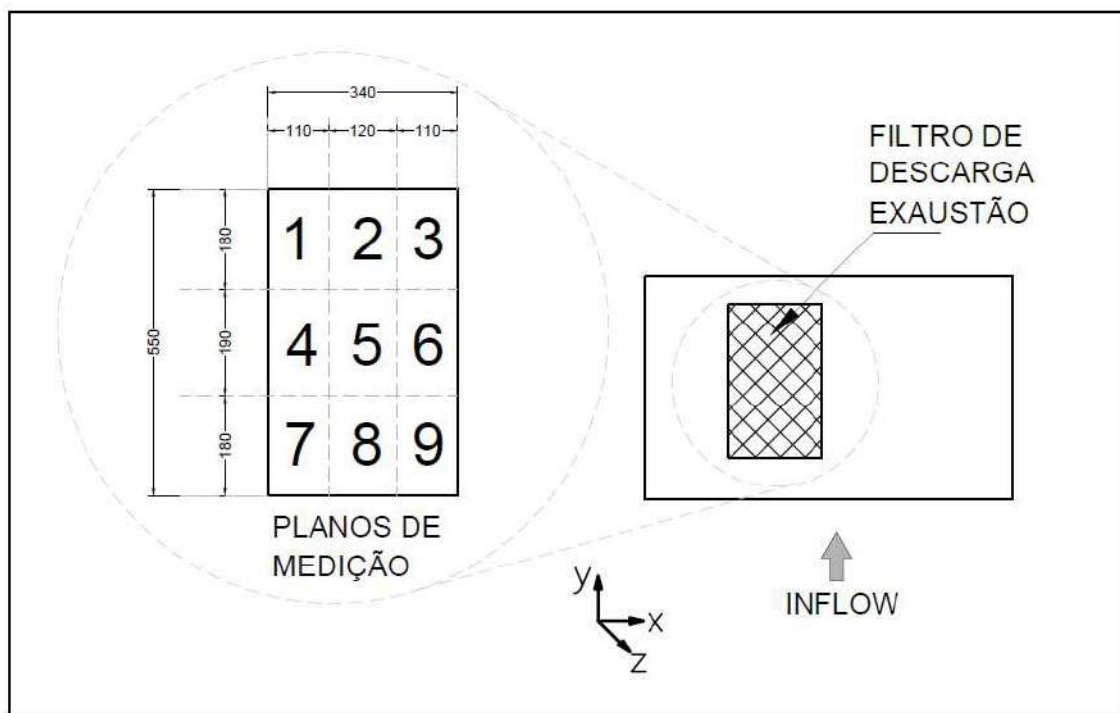


Figura 6.4 Planos de medição da velocidade de descarga na BSC.

Como a continuidade determina que a vazão de *inflow* deve ser teoricamente igual à de exaustão, obtém-se a velocidade de *inflow* a partir dos valores da vazão de exaustão e da área da abertura da janela da cabine ($\bar{A}_{face,inflow}$).

O anemômetro em questão disponibiliza função de determinação da velocidade média temporal, que foi utilizada, com um tempo de medição de 60s em cada ponto.

Os resultados desta medição, bem como a velocidade de *inflow* resultante, encontram-se nas tabelas a seguir.

Tabela 6.3 Resultados das Medições das Velocidades Médias de Exaustão da BSC

i (plano de medição)	\bar{U}_i [m.s ⁻¹]
1	0,78
2	0,50
3	0,65
4	0,75
5	0,47
6	0,61
7	0,75
8	0,55
9	0,57
média	0,63

Tabela 6.4 Resultados das Medições da Velocidade de *Inflow* a Partir da Vazão de Exaustão da BSC

Parâmetro medido	valor
$\bar{U}_{face,filter}$ [m.s ⁻¹]	0,63
$\bar{A}_{face,filter}$ [m ²]	0,1870
\dot{V}_{inflow} [l.s ⁻¹]	117
$\bar{A}_{face,inflow}$ [m ²]	0,2124
$\bar{U}_{inflow,result}$ [m.s ⁻¹]	0,55

Para a 2ª medição, diretamente na abertura da área de trabalho, foi utilizado um anemômetro digital, com sonda de fio quente (omnidirecional), fabricante TESTO, modelo 445, precisão de 0,03 m.s⁻¹. Foram realizadas medições da velocidade de

inflow em diversos planos da abertura da janela da cabine, determinados pela norma NSF-49, conforme figura a seguir.

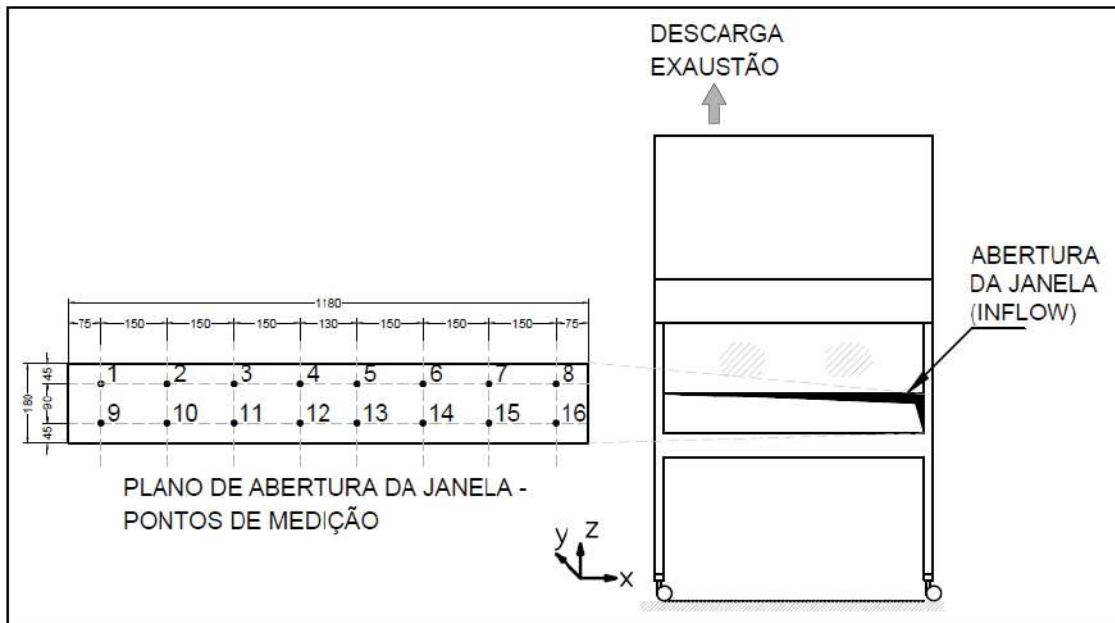


Figura 6.5 Planos de medição da velocidade de *inflow* na BSC.

Previamente a cada medição, a sonda foi posicionada em um suporte fixo autoportante, próprio para minimização da perturbação ao escoamento na zona de interesse. A figura a seguir ilustra um arranjo para as medições realizadas.



Figura 6.6 Arranjo para medições da velocidade de inflow da BSC utilizando-se anemômetro de fio quente

O anemômetro em questão também disponibiliza função de determinação da velocidade média temporal, que foi utilizada, com um tempo de medição de 60s em cada ponto. Duas medições sucessivas foram separadas por um intervalo de tempo mínimo de 60s, após o reposicionamento da sonda. Este intervalo tem o objetivo de permitir o reestabelecimento do escoamento da perturbação causada pelo reposicionamento. O tempo médio de residência de uma partícula de fluido, escoando no interior da cabine, foi estimado em 2s, em função dos parâmetros operacionais globais. Este intervalo mínimo de 60s foi adotado, então, por ser consideravelmente maior do que a escala de tempo do escoamento no interior da cabine. Verificou-se, durante as medições, que este intervalo demonstrou-se suficientemente adequado (oscilações pontuais de velocidade com amplitude compatível com a intensidade turbulenta local, mas com uma média praticamente constante).

Os resultados desta medição, bem como a velocidade de *inflow* resultante, encontram-se nas tabelas a seguir.

Tabela 6.5 Resultados das Medições da Velocidade Média de *Inflow* da BSC

i (plano de medição)	\bar{U}_i [m.s ⁻¹]
1	0,34
2	0,32
3	0,32
4	0,34
5	0,31
6	0,33
7	0,36
8	0,33
9	0,81
10	0,77
11	0,76
12	0,76
13	0,76
14	0,77
15	0,81
16	0,79
média	0,56

Observa-se uma diferença de 1,8% para a velocidade de *inflow*, determinada pelas duas medições adotadas, com instrumentos e métodos diferentes. Esta diferença foi considerada suficientemente aceitável, e verifica-se que a velocidade medida está de acordo com o valor determinado pela NSF-49 (2009) para esta classe de cabine.

Nova medição da vazão de exaustão foi realizada ao término de todos os experimentos, utilizando-se a mesma metodologia, onde se observou uma variação de 0,2% em relação à vazão medida no início dos experimentos. Conclui-se que o equipamento manteve um estado operacional suficientemente constante durante a realização dos experimentos. Também foram registradas as temperaturas do ar da sala no início e no fim de todos os experimentos. Esta encontrava-se em 24,7 °C no início, e a 23,7 °C no fim. Ao longo dos experimentos, esta temperatura foi constantemente monitorada, e verificou-se uma alteração máxima de 1,5°C. Verifica-se que as oscilações foram suficientemente pequenas, de modo que se garante que não influenciaram nos resultados.

Após estas verificações quantitativas, foi realizada uma análise qualitativa dos padrões de escoamento, através da visualização com fumaça. Este teste também é preconizado pela norma NSF-49, e sua metodologia encontra-se descrita em seu anexo A (NSF, 2009). Tem por objetivo verificar a capacidade de contenção da fumaça visível gerada no interior da cabine, e o padrão de escoamento unidirecional na região de *downflow*. A realização deste teste, ilustrado na figura a seguir, demonstrou um padrão operacional aceitável para o equipamento em questão.



Figura 6.7 Teste de Visualização do Escoamento da Cabine com Fumaça.

Após a verificação de que a cabine apresentava operação estável, dentro dos valores preconizados pela NSF-49, foram iniciadas as medições de velocidade no interior da área de trabalho. Foram medidas as velocidades em dois planos horizontais, situados a 100mm e a 370mm da mesa de trabalho. Esta seção ($z=370\text{mm}$) foi selecionada em função de que é fortemente influenciada pelo escoamento em padrão unidirecional do fluxo de *downflow*. A seção situada a 100m foi selecionada porque se localiza na região de manipulação das amostras (fonte de contaminantes), e porque apresenta uma região de escoamento de alta complexidade, influenciada tanto pelo fluxo de *downflow* quanto pelo fluxo de *inflow* e de exaustão.

As posições das medições em cada plano foram norteadas pelas prescrições da NSF-49 para medição do *downflow*, e estão ilustradas na figura a seguir.

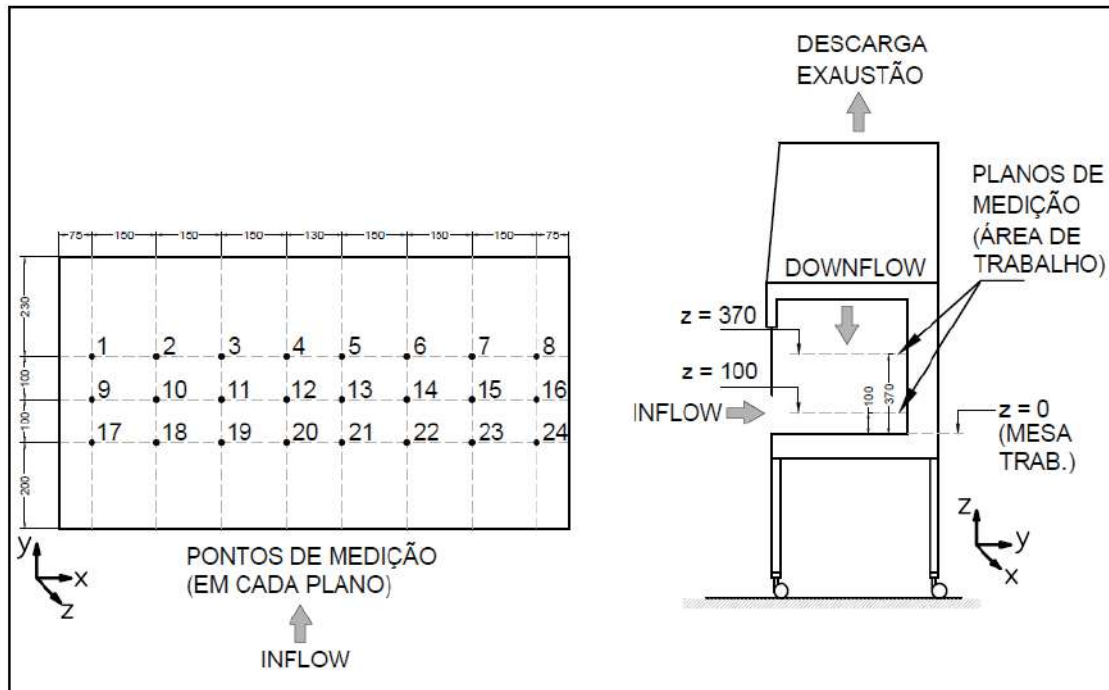


Figura 6.8 Pontos de medição da velocidade na área de trabalho da BSC.

Estas medições foram realizadas com o mesmo anemômetro digital, com sonda de fio quente, fabricante TESTO, modelo 445, precisão de $0,03 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Previamente a cada medição, a sonda foi posicionada em um suporte fixo autoportante, próprio para minimização da perturbação ao escoamento na zona de interesse. Foi adotado o mesmo intervalo de tempo mínimo de 60s, entre duas medições sucessivas, após o reposicionamento da sonda, de modo a permitir o reestabelecimento do escoamento, da perturbação causada pela movimentação. Durante cada medição, os dados foram adquiridos durante 60s, e a média temporal obtida, calculada pelo aparelho, foi utilizada. As velocidades das grelhas de exaustão foram medidas com esta mesma metodologia. A figura a seguir ilustra as medições realizadas.



Figura 6.9 Medições das velocidades da área de trabalho da BSC utilizando-se anemômetro de fio quente

Após o término das medições, estas foram repetidas mais duas vezes, obtendo-se um conjunto de três dados para cada ponto medido, de modo a verificar a dispersão e repetibilidade dos resultados. Foi selecionado o cálculo do desvio padrão para esta verificação.

Os resultados detalhados desta medição encontram-se nas tabelas do Anexo H.

O conjunto destas medições permitiu caracterizar os dados operacionais básicos da cabine, de modo que a mesma pudesse ser modelada nas simulações desta tese. Estes dados operacionais encontram-se resumidos na tabela a seguir:

Tabela 6.6 Condições Operacionais da Cabine de Segurança Biológica

Dados operacionais	valor
Classificação conforme NSF-49 (NSF, 2009)	Classe II-A2
Largura nominal (m)	1,20
Vazão de <i>downflow</i> ($L. s^{-1}$)	278
Velocidade média de <i>downflow</i> ($m. s^{-1}$)	0,37
Vazão de descarga / <i>inflow</i> ($L. s^{-1}$)	117
Velocidade média de <i>inflow</i> ($m. s^{-1}$)	0,55
Velocidade média de descarga ($m. s^{-1}$)	0,63
Vazão total de exaustão ($L. s^{-1}$)	395
Velocidade média nas frestas de exaustão ($m. s^{-1}$)	7,10

6.2.2. VALIDAÇÃO DA MODELAGEM NUMÉRICA DAS CONDIÇÕES OPERACIONAIS DA CABINE DE SEGURANÇA BIOLÓGICA

Esta seção tem por objetivo apresentar os resultados da validação da modelagem numérica das condições operacionais da cabine de segurança biológica (BSC) utilizada nesta tese. Um modelo foi construído com as condições de contorno compatíveis com os dados operacionais medidos e apresentados na seção anterior. Os detalhes do modelo e das condições de contorno encontram-se no anexo D.

Três malhas foram selecionadas para o teste de independência de malha. As malhas envolvidas apresentam aproximadamente 5.000.000, 3.400.000 e 500.000 elementos tetraédricos. Para este teste, as seguintes variáveis de campo foram avaliadas: velocidade em 3 pontos do plano horizontal superior (37cm acima da mesa de trabalho, pontos 10, 12 e 15 conforme fig. 6.8), sob a influência do fluxo de *downflow*; 3 pontos do plano horizontal inferior (10cm acima da mesa de trabalho, pontos 10, 12 e 15 conforme fig. 6.8), sob a influência dos fluxos de *downflow* e *inflow*; 6 pontos do plano de abertura da janela (pontos 2, 4, 7, 10, 12 e 15 conforme fig. 6.5), sob a influência do fluxo de *inflow*; Os resultados deste teste, bem como o erro numérico associado, encontram-se na tabela a seguir:

Tabela 6.7 Teste de Independência de Malha da Modelagem da Cabine de Segurança Biológica

Malha avaliada	1	2	3	Variação %		Erro numérico associado (GCI)
				1→2	2→3	
Nº de elementos	0,5 Mi	3,4 Mi	5,0 Mi			
$\bar{U}_{down,inf,10}$	0,2428	0,2347	0,2346	-3,45 %	-0,04 %	0,1 %
$\bar{U}_{down,sup,10}$	0,3659	0,3652	0,3650	-0,19 %	-0,05 %	0,2 %
$\bar{U}_{down,inf,12}$	0,2427	0,2400	0,2389	-0,59 %	-0,46 %	0,7 %
$\bar{U}_{down,sup,12}$	0,3680	0,3676	0,3673	-0,11 %	-0,08 %	0,2 %
$\bar{U}_{down,inf,15}$	0,2424	0,2370	0,2356	-2,28 %	-0,59 %	0,8 %
$\bar{U}_{down,sup,15}$	0,3659	0,3654	0,3652	-0,14 %	-0,05 %	0,1 %
$\bar{U}_{inflow,2}$	0,4207	0,4317	0,4338	2,55 %	0,48 %	0,7 %

Malha avaliada	1	2	3	Variação %		Erro numérico associado (GCI)
$\bar{U}_{inflow,4}$	0,4312	0,4431	0,4461	2,69 %	0,65 %	1,0 %
$\bar{U}_{inflow,7}$	0,4197	0,4339	0,4344	3,27 %	0,12 %	1,0 %
$\bar{U}_{inflow,10}$	0,7731	0,7964	0,8017	2,93 %	0,66 %	0,9 %
$\bar{U}_{inflow,12}$	0,7767	0,8078	0,8098	3,85 %	0,25 %	0,3 %
$\bar{U}_{inflow,15}$	0,7746	0,7960	0,8018	2,69 %	0,72 %	1,0 %

Nota: onde: $\bar{U}_{down,inf}$: Representa a velocidade no plano horizontal inferior, nos pontos 10,12 e 15, tal como figura 6.8; $\bar{U}_{down,sup}$: Representa a velocidade no plano horizontal superior, nos pontos 10,12 e 15, tal como figura 6.8; \bar{U}_{inflow} : Representa a velocidade no plano da janela, nos pontos 2,4,7,10,12 e 15, tal como figura 6.5;

Os resultados do teste precedente permitem selecionar a malha intermediária, que apresenta erro numérico máximo, avaliado pelo método GCI (ROACHE,1996), de 1,0%. As características gerais adotadas na simulação numérica são idênticas àquelas já apresentadas na tabela 5.4, para o código FLUENT. Os resultados da comparação dos valores simulados com os valores medidos, encontram-se na tabela a seguir:

Tabela 6.8 Resultados da Validação da Modelagem Numérica da Cabine de Segurança Biológica

i	$U_{i,exp}$ [m. s ⁻¹]	$U_{i,sim}$ [m. s ⁻¹]	dif. Abs. %
inflow- ponto 2	0,33	0,43	30,3%
inflow-ponto 15	0,78	0,80	2,6%
Downflow-inferior-frente-ponto 19	0,42	0,41	2,4%
downflow-superior-frente-16	0,42	0,37	11,9%
downflow-inferior-meio-ponto 12	0,22	0,24	9,1%
downflow-superior -meio-ponto 12	0,36	0,37	2,8%
downflow-inferior-traseira-ponto 8	0,19	0,23	21,1%
Downflow-superior-traseira-ponto 4	0,34	0,37	8,8%
Diferença média relativa			11,1%

Nota: onde: inferior = plano horizontal, h=10cm acima da mesa; : superior = plano horizontal, h=37cm acima da mesa; posições de acordo com as figuras 6.5 e 6.8; $U_{i,exp}$: dados experimentais; $U_{i,sim}$: dados obtidos pela simulação;

Uma análise qualitativa do campo de velocidades pode ser realizada através da figura a seguir, que mostra as linhas de corrente no plano central da cabine:

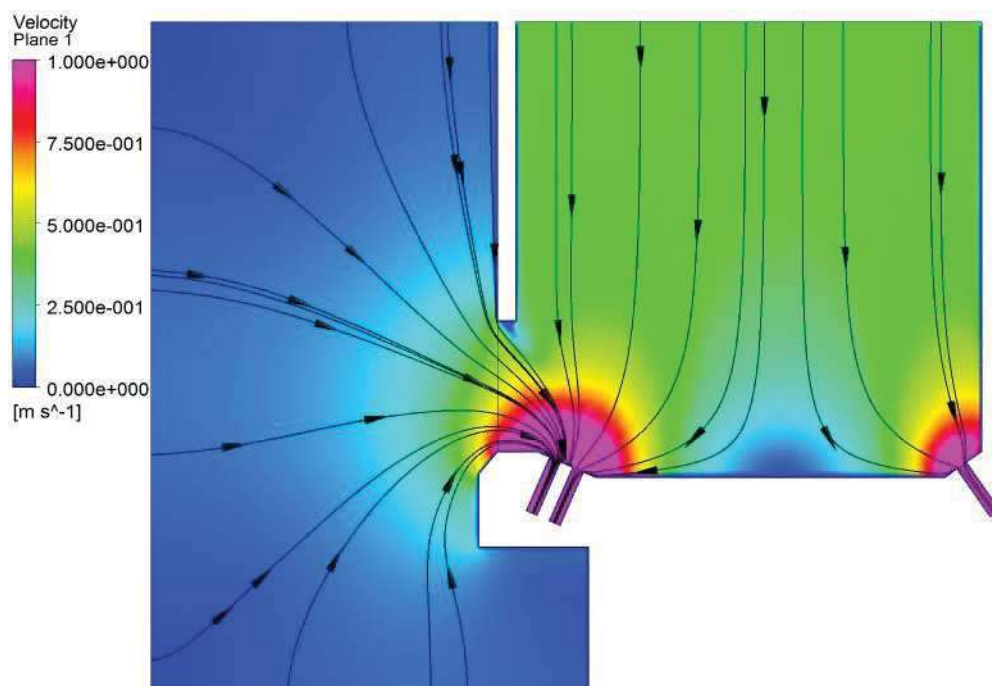


Figura 6.10 Padrão de escoamento no interior da BSC, conforme simulação numérica

O escoamento na região interna à cabine, acima da abertura da janela, é governado basicamente pelo fluxo de *downflow*. As linhas de corrente demonstram que a simulação reproduz o padrão unidirecional (aproximado), característico desta região. O posicionamento das frestas de exaustão em extremidades opostas cria uma região de estagnação próxima à mesa de trabalho, na região central. Esta região de estagnação é característica desta classe de equipamentos (OLANDER *et al*, 2001), e a simulação reproduz este padrão. A vazão de inflow promove a aceleração advectiva do escoamento na região da janela, e observa-se que a exaustão das frestas frontais influencia a distribuição da velocidade de inflow. Esta não é homogênea em função da altura da abertura, tal como verificado nos resultados experimentais. Os dados das medições associadas, constantes na tabela 6.5, demonstram que a velocidade é menor nos pontos 1 a 8, e maior nos pontos 9 a 16. Pela análise qualitativa da figura anterior, e quantitativa das tabelas 6.5 e 6.8, observa-se que a simulação reproduz esta situação. Usando-se a metodologia da ASHRAE (2009) para graduar o desempenho da simulação, podemos considerá-la aceitável para modelagem do campo de velocidades da cabine de segurança biológica.

6.3. MODELAGEM DO CONTAMINANTE

Esta tese tem por objetivo a análise da aerodispersão de partículas associadas ao núcleo residual de gotículas (*droplet nuclei*), em função de que estas estão bem caracterizadas nos acidentes laboratoriais e na infecção por via aérea, tal como discutido no capítulo 2. Esta modelagem promove a escolha do tipo esférico de partículas, para as quais o diâmetro é a dimensão característica (FRIEDLANDER, 2000). As análises foram limitadas às características físicas da aerodispersão destas partículas, sem considerações sobre a quantidade ou viabilidade dos microorganismos nela contidos. A caracterização do diâmetro representativo foi realizada em função dos seguintes critérios:

- a) Critério de maior eficiência de penetração nas vias aéreas profundas;
- b) Critério de maior tempo de suspensão / menor taxa de deposição em superfícies;
- c) Critério de tamanho associado à maior quantidade de LAIs (infecções adquiridas no laboratório);
- d) Critério de tamanho associado aos acidentes com maior risco de produção de bioaerossol;

A faixa de diâmetros que apresenta maior risco de penetração no trato respiratório inferior (alvéolos) está compreendida na ordem de grandeza de 1 μm (ASHRAE, 2013a). A faixa de diâmetros que apresenta maior tempo de suspensão e menor taxa de deposição em superfícies está compreendida nas ordens de grandeza de 0,1 μm a 1 μm (FRIEDLANDER, 2000; NAZAROFF, 2004). A faixa de diâmetros associados a maior quantidade de LAIs está compreendida nas ordens de grandeza de 1 μm a 10 μm (CDC, 2003; ASHRAE, 2014). A faixa de diâmetros associados aos acidentes com maior risco de produção de bioaerossol está compreendida na ordem de grandeza de 1 μm (BENNETT *et* PARKS, 2006). A ordem de 1 μm , presente em todas estas faixas, foi então selecionada.

Assim, esta tese procura estudar o transporte de partículas esféricas associadas ao núcleo residual de gotículas (*droplet nuclei*) com diâmetro aerodinâmico na ordem de 1 μm .

Para esta classe de partículas, o tempo de evaporação das gotículas originais associadas é desprezível, conforme dados de MORAWSKA (2006) e YANG *et al* (2011). Assim, para efeitos das análises, as partículas apresentam diâmetro constante e imutável. O tempo de relaxação para partículas deste diâmetro também é muito pequeno (nano a microsegundos, conforme seção 4.2), e como a concentração é baixa, as partículas não modificam o escoamento, mas são submetidas à advecção e difusão através dele. Para análise do transporte destas partículas, os termos gravitacionais e a deposição podem ser desprezados (WANG *et al*, 2012). Os resultados dos estudos experimentais de YIN *et al* (2009) demonstraram pouca diferença na eficácia de ventilação (ξ), entre a modelagem do contaminante como um gás marcador (SF6) e como partículas monodispersas de 1 a 3 μm . Suas conclusões são de que a análise da aerodispersão de partículas com dimensões de alguns micrometros pode ser estudada através do transporte de um gás marcador, como o SF6. OLANDER *et al* (2001) também mencionam que a técnica do uso de um gás marcador (*tracer gas*) é adequada para o estudo do transporte de partículas com diâmetro menor do que 5 μm . WANG *et al* (2012) mencionam que o modelo euleriano de modelagem, com a premissa do *continuum*, é adequado para modelagem de partículas micrométricas. Assim, para análise do desempenho de contenção, o contaminante foi modelado como um gás marcador (*tracer gas*), dado que o objetivo desta pesquisa está relacionado à comparação de desempenho de vários cenários, e não na previsão precisa de uma dose de exposição. O modelo de mistura homogênea foi selecionado para a modelagem do transporte do contaminante passivo. Neste modelo, o fluido é uma mistura homogênea de ar e contaminante (SF6), e os campos de velocidade, pressão, turbulência e temperatura são comuns às duas fases. As definições e equações associadas a este modelo, apresentadas na seção 5.5, também se aplicam neste caso. Em todos os cenários testados, o contaminante é gerado no interior da cabine de segurança biológica (BSC). A inserção do contaminante é modelada pela imposição de uma concentração de 1% (na base mássica) ao fluxo de *downflow*, interno à BSC. Esta baixa concentração foi adotada de modo a manter a massa específica da mistura próxima à do ar. Como a

geração de contaminante está restrita ao interior da BSC, a sua capacidade de contenção é um fator primordial na minimização da aerodispersão do mesmo para o laboratório.

6.4. CÁLCULO DOS FATORES DE CONTENÇÃO

Esta seção tem por objetivo detalhar o cálculo dos fatores de contenção utilizados nas análises comparativas desta tese, e já apresentados na seção 1.2.

6.4.1. FATOR DE VAZAMENTO DA CABINE (SLF)

A capacidade da BSC na contenção dos contaminantes foi quantificada, principalmente, por meio do fator de vazamento da cabine (SLF, *sash leakage factor*), adotando metodologia semelhante à de MEMARZADEH (1996). Este fator é calculado pela razão entre a vazão de contaminantes que escapa da cabine e a taxa de geração de contaminantes. Considerando-se o volume de controle limitado pelas paredes, teto e piso, entradas e saídas de ar do laboratório, conforme figura esquemática a seguir:

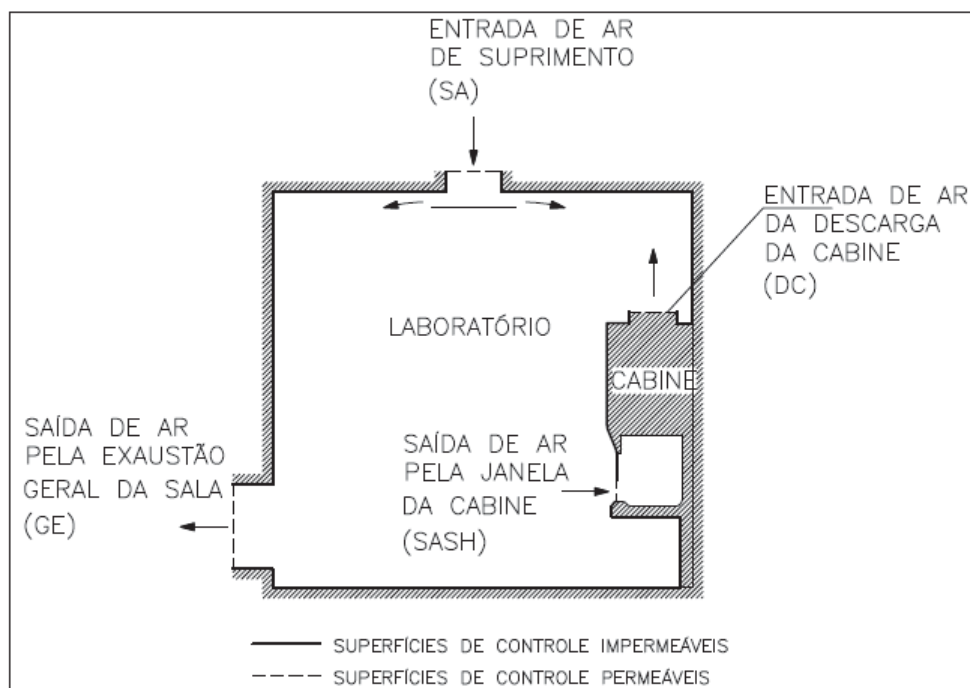


Figura 6.11 Volume de Controle esquemático utilizado na definição dos fatores de contenção

A integração da equação de transporte do contaminante (Eqs. 5.4), em regime permanente e ausência de fontes, no volume de controle, produz a seguinte equação:

$$\int [\nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \overline{\chi_c})] dV = - \int (\nabla \cdot \mathbf{J}_c) dV, \quad (6.1)$$

onde \mathbf{J}_c é o fluxo médio de contaminantes, causado pela difusão molecular e pelo transporte turbulento. A aplicação do teorema da divergência na equação anterior produz:

$$\int [(\rho \mathbf{U} \overline{\chi_c}) \cdot \mathbf{n}] dA = - \int (\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n}) dA. \quad (6.2)$$

Considerando-se as seguintes condições de contorno:

a) Paredes:

- Impenetrabilidade e não-eskorregamento: $\mathbf{U} = 0$ (6.3)

- Deposição de contaminantes desprezível: $\mathbf{J}_c = 0$ (6.4)

b) Entradas de ar no laboratório (ar exterior filtrado):

- Concentração nula de contaminantes: $\overline{\chi_c} = 0$ (6.5)

- Fluxo de contaminantes desprezível: $\mathbf{J}_c = 0$ (6.6)

c) Saída de ar pela exaustão geral (GE):

- Fluxo de contaminantes desprezível: $\mathbf{J}_c = 0$ (6.7)

A integral da equação 6.2 é resumida a:

$$\int_{GE} [(\rho \mathbf{U} \overline{\chi_c}) \cdot \mathbf{n}] dA + \int_{SASH} [(\rho \mathbf{U} \overline{\chi_c}) \cdot \mathbf{n}] dA = - \int_{SASH} (\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n}) dA. \quad (6.8)$$

A integral do lado direito da equação produz a vazão mássica de vazamento de contaminante pela janela, $\dot{D}_{C,SASH}$, o parâmetro de interesse. As integrais do lado esquerdo representam a vazão mássica de contaminantes que é transportada por advecção pela exaustão geral (GE), $\dot{F}_{C,GE}$, e pela janela (SASH), $\dot{F}_{C,SASH}$, através do fluxo de *inflow*. Esta formulação utiliza a premissa de que o fluxo de contaminante pela janela é totalmente resultante da difusão molecular e do transporte turbulento, sem o termo de advecção que estaria presente em um escoamento reverso. Esta hipótese é condizente com o desempenho da BSC, como um equipamento de segurança, e foi confirmada nas simulações, para os casos testados. A garantia das condições de

contorno representadas pelas equações (6.6) e (6.7) é obtida pela especificação das superfícies de controle associadas numa posição suficientemente distante, a montante da entrada de ar, e a jusante da saída.

Dado que a geração de contaminantes no interior da cabine é modelada pela imposição da concentração de 1% (na base mássica) no fluxo de *downflow*, o fator de vazamento da cabine é calculado por:

$$SLF = \dot{D}_{C,SASH} / (0,01 \times \dot{m}_{downflow}) \quad (6.9)$$

A modelagem pelo método dos volumes finitos, e a solução numérica associada, demandam que as integrais do lado esquerdo da equação (6.8) sejam aproximadas por uma soma pelas superfícies de controle determinadas pela discretização, de modo que o vazamento de contaminantes pela janela da BSC é aproximado por:

$$\dot{D}_{C,SASH} = \sum_{i=1}^n \rho u_i \chi_i A_i)_{GE} + \sum_{i=1}^n \rho u_i \chi_i A_i)_{SASH} , \quad (6.10)$$

onde u_i é a velocidade normal associada, e A_i é a área da faceta considerada.

6.4.2. FATOR DE DISPERSÃO PARA A SALA (BLF)

O fator de dispersão para a sala foi definido de modo semelhante ao fator de vazamento da caixa (BLF, *box leakage factor*), utilizado por MEMARZADEH (1996). Este fator quantifica o percentual de vazamento da BSC que é efetivamente transportado para a sala, dado que um percentual do vazamento é removido pela advecção imposta pelo fluxo de *inflow* da BSC. Seguindo-se a formulação da seção anterior, este fator é calculado por:

$$BLF = \dot{F}_{C,GE} / (0,01 \times \dot{m}_{downflow}) \quad (6.11)$$

6.4.3. FATOR DE PROTEÇÃO DA CABINE (PF)

O fator de proteção (PF, *protection factor*) é usualmente adotado para analisar a eficácia de equipamentos de exaustão local (OLANDER *et al*, 2001), sendo a razão

entre a concentração de contaminante na exaustão do equipamento e na zona de respiração do operador:

$$BLF = \bar{\chi}_{C,BSCexh} / \bar{\chi}_{C,breathing} \quad (6.12)$$

A zona de respiração do operador foi avaliada em um ponto localizado a uma distância de 0,15m da janela, e a uma altura de 1,20m do piso.

6.4.4. EFICÁCIA DE VENTILAÇÃO (ξ)

A eficácia de ventilação (ξ , *ventilation effectiveness*) é um parâmetro usualmente adotado em estudos de ventilação para controle de infecção (JIN et al, 2012; MEMARZADEH et XU, 2012; CHEN et al, 2014), sendo a razão entre a concentração de contaminante na exaustão geral da sala e no ponto de interesse:

$$BLF = \bar{\chi}_{C,GE} / \bar{\chi}_{C,p} \quad (6.13)$$

6.5. METODOLOGIA DOS TESTES DE SENSIBILIDADE DE CONTENÇÃO

Esta seção tem por objetivo detalhar a metodologia associada aos testes de sensibilidade da capacidade de contenção da BSC a diferentes padrões de escoamento do ar, resultantes de variações nas condições de contorno impostas.

6.5.1. TESTE DE SENSIBILIDADE DA INTENSIDADE TURBULENTE DE *DOWNFLOW* NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Este teste foi conduzido de modo a avaliar a sensibilidade de desempenho de contenção a diferentes valores da intensidade turbulenta do fluxo de *downflow* da BSC. Como o vazamento de contaminantes é sensível à intensidade turbulenta do escoamento na sala (MEMARZADEH, 1996), o primeiro objetivo foi o de avaliar se a intensidade turbulenta do fluxo de *downflow* apresenta uma parcela relevante nesta contribuição. Caso positivo, os fabricantes de BSCs deveriam conduzir o projeto dos equipamentos para soluções que reduzissem a intensidade turbulenta deste fluxo. O segundo objetivo

foi de avaliar o impacto do valor adotado para a intensidade turbulenta na condição de contorno nos resultados numéricos, já que a incerteza deste valor é alta, dado que esta informação não se encontra disponibilizada.

Dois casos foram comparados: o caso *baseline*, adotando-se o laboratório base (características conforme tabelas 6.1 e 6.6) com 10% de intensidade turbulenta no *downflow* (alta intensidade de turbulência); E um segundo caso, *baseline-LT*, contendo as mesmas características do caso *baseline*, mas com 3% de intensidade turbulenta no *downflow* (uma redução de 70%). O fator de vazamento da cabine (SLF) foi adotado para analisar a capacidade de contenção. Os valores deste parâmetro foram previstos para cada caso, em regime permanente, e comparados.

6.5.2. TESTE DE SENSIBILIDADE DA CARGA TÉRMICA DO LABORATÓRIO NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Este teste foi conduzido de modo a avaliar a sensibilidade de desempenho de contenção a diferentes valores da carga térmica devido à dissipação de calor proveniente dos equipamentos laboratoriais. Dois casos foram comparados: O caso *baseline*, já definido na seção anterior, com 86 W.m^{-2} de taxa de dissipação de calor; e um segundo caso, *baseline-isothermal*, com as mesmas características do caso *baseline*, mas sem dissipação de calor (modelado como isotérmico, a uma temperatura constante de 22°C). Este teste se torna necessário na medida que a incerteza associada à taxa de dissipação de calor dos equipamentos laboratoriais é elevada, em função da ausência de dados confiáveis. Esta situação é um problema bem caracterizado que impacta no superdimensionamento dos sistemas de ventilação e ar condicionado (HVAC) de ambientes laboratoriais (FRENZE *et al*, 2005). FRENZE *et al* (2005) mencionam diversos estudos de casos, cujos resultados demonstraram que a real dissipação de calor dos equipamentos laboratoriais era muito menor do que as premissas adotadas no dimensionamento da carga térmica. Somando-se a esta situação ao fato de que nem todos os equipamentos laboratoriais operam simultaneamente, e que sua dissipação de calor não é constante, produz um sistema de HVAC que opera em carga parcial na maior parte do tempo. A operação em carga parcial aproxima a temperatura de insuflação à temperatura da sala, reduzindo-se as fontes de quantidade de movimento

associadas ao empuxo térmico, produzindo um campo de velocidades mais próximo da condição isotérmica.

O fator de vazamento da cabine (SLF) e o fator de proteção (PF) foram adotados para analisar a capacidade de contenção. O fator de dispersão para a sala (BLF) também foi avaliado para os dois casos, considerando-se que a dissipação de calor altera o campo de escoamento pela presença do empuxo térmico. Os valores destes parâmetros foram previstos para cada caso, em regime permanente, e comparados.

6.5.3. TESTE DE SENSIBILIDADE DA VELOCIDADE DE *INFLOW* NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Este teste foi conduzido de modo a avaliar a sensibilidade de desempenho de contenção a diferentes valores da velocidade de *inflow* da BSC. A norma padrão de certificação destes equipamentos, NSF-49 (NSF, 2009) determina que a velocidade de inflow deve estar na faixa entre 0,51 a 0,56 $m.s^{-1}$. OLANDER *et al* (2001) mencionam que uma redução na velocidade de inflow estará relacionada a uma redução no desempenho de contenção. A norma *Laboratory Ventilation* (ANSI *et al*, 2012) apresenta informação de que uma velocidade de inflow inferior a 0,3 $m.s^{-1}$ é incapaz de promover um desempenho de contenção aceitável. Dois casos foram comparados: O caso *baseline-isothermal*, já definido na seção anterior, com 0,55 $m.s^{-1}$ de velocidade de inflow; e um segundo caso, *baseline-isotherma-LIVL*, com as mesmas características do caso *baseline-isothermal*, com 0,25 $m.s^{-1}$ de velocidade de inflow. Estas simulações foram realizadas no modo isotérmico, a uma temperatura constante de 22°C. O fator de vazamento da cabine (SLF) e o fator de proteção (PF) foram adotados para analisar a capacidade de contenção. Os valores destes parâmetros foram previstos para cada caso, em regime permanente, e comparados.

6.5.4. TESTE DE SENSIBILIDADE DA TAXA DE RENOVAÇÃO DE AR NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Este teste foi conduzido de modo a avaliar a sensibilidade de desempenho de contenção a diferentes valores da taxa de renovação de ar do laboratório. O mesmo laboratório, modelado pelo caso *baseline-isothermal*, foi testado com diferentes valores

de taxa de renovação de ar, relativas a 17 ACH (*air changes per hour*, Caso A), 15 ACH (Caso B) e 9 ACH (Caso C). O caso intermediário, B (15 ACH), com parâmetros sensivelmente diferentes do caso A (17 ACH), foi selecionado para avaliar a proporcionalidade de variações do teste, e produzir um parâmetro de análise da qualidade da simulação numérica. É esperado que poucas variações no campo de escoamento estejam associadas à comparação dos casos A e B (redução de 11,8% na taxa de renovação), enquanto que uma maior variação esteja associada à comparação dos casos A e C (redução de 47,1% na taxa de renovação). Estas simulações foram realizadas no modo isotérmico, a uma temperatura constante de 22°C, e características gerais conforme a tabela a seguir:

Tabela 6.9 Dados Gerais dos Casos sobre o Mesmo Laboratório, mas com diferentes Taxas de Renovação de Ar

Dados gerais	Caso A	Caso B	Caso C
ACH (<i>Air changes per hour</i>)	17	15	9
Vazão de ar de insuflação (L/s)	323	285	172
Vazão de infiltração pela porta (L/s)	47	47	47
Vazão de exaustão geral (L/s)	370	332	219

O fator de vazamento da cabine (SLF) e o fator de proteção (PF) foram adotados para analisar a capacidade de contenção. O fator de dispersão para a sala (BLF) também foi avaliado para os três casos. Os valores destes parâmetros foram previstos para cada caso, em regime permanente, e comparados.

6.6. ANÁLISE DA ESCALA DE TEMPO ASSOCIADA AO VAZAMENTO DE CONTAMINANTE DO INTERIOR DA BSC À ZONA DE RESPIRAÇÃO DO OPERADOR

Esta simulação foi conduzida de modo a estimar a ordem de grandeza do tempo associado ao transporte de um contaminante gerado no interior da BSC à zona de

respiração do operador, após o estabelecimento de um aumento na concentração no interior da BSC (degrau). Esta simulação, em regime transiente, foi conduzida usando-se um modelo simplificado do laboratório, em 2D, em função da limitação de recursos computacionais. Entretanto, este modelo foi construído de modo a conservar as características gerais do laboratório e de seu campo de escoamento, tal como nos modelos envolvidos nas simulações precedentes. Este modelo encontra-se representado na figura a seguir:

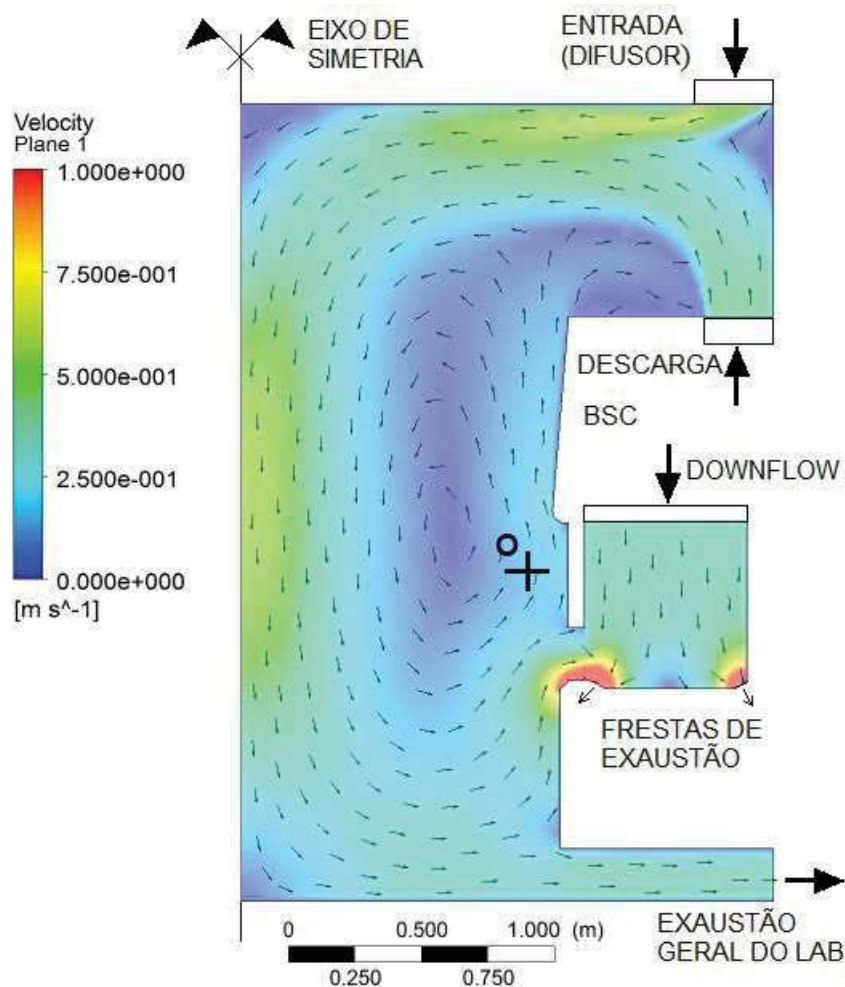


Figura 6.12 Configuração do Laboratório e do Campo de Escoamento Associado, para a Simulação Transiente do Transporte de Contaminante

O campo de escoamento foi modelado em regime permanente, com características compatíveis com aquelas produzidas pelo modo de ventilação por mistura (MV). O campo de escoamento simulado para o interior da BSC apresenta características compatíveis com aquela região, tal como discutido na seção 6.2.2.

A condição inicial associada ao modelo é de ausência de contaminantes em todo o domínio, para $t = 0s$. Foi imposta uma concentração fixa de contaminante à condição de contorno do fluxo de *downflow*, o que provê um rápido preenchimento da região interna da cabine com contaminante. A variação temporal da concentração de contaminante na posição de respiração do operador (ponto O da figura) foi analisada, de modo a estimar a escala de tempo associada ao fenômeno de transporte.

6.7. METODOLOGIA DAS SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

As simulações numéricas foram conduzidas usando-se o código ANSYS FLUENT, versão 14.5, com metodologia similar àquela já utilizada nas validações (capítulo 5). As características gerais deste código encontram-se no capítulo 5, bem como as equações envolvidas na modelagem. Um resumo das principais características encontra-se na tabela a seguir:

Tabela 6.10 Características principais da modelagem matemática e numérica

código		FLUENT
Método		Volumes finitos
Regime de escoamento		incompressível
Acoplamento Pressão - velocidade		SIMPLE
Modelo de turbulência		RNG- $k\epsilon$
Modelagem do transporte de contaminante		Modelo de mistura homogênea
Esquema de interpolação do Termo convectivo		Upwind 2ª ordem
Critério de convergência (erro residual máximo)	continuidade	10^{-4}
	quantidade de movimento	10^{-4}
	Variáveis turbulentas	10^{-4}
	energia	10^{-6}
	contaminante	10^{-6}
Critério de convergência (imbalace)		0,01%

Previamente às simulações, uma malha foi selecionada, para representação do escoamento no laboratório base. Para esta tarefa, o teste de independência de malha foi realizado, conforme a metodologia proposta por ROACHE (1996) e CELIK *et al* (1993). Os resultados deste teste encontram-se no próximo capítulo. As condições de contorno do modelo associado ao laboratório *baseline* encontram-se detalhadas no anexo E.

7. RESULTADOS E ANÁLISES

7.1. TESTES DE REFINAMENTO DE MALHA

As malhas utilizadas, com diferentes tamanhos, possuem aproximadamente 5.700.000, 3.200.000 e 1.600.000 elementos tetraédricos. O seu pré-dimensionamento foi realizado em função das dimensões das malhas utilizadas no caso de validação do *benchmark* de laboratório e de simulação da cabine de segurança biológica. A qualidade da malha foi avaliada em função de alguns parâmetros, mostrados na tabela a seguir:

Tabela 7.1 Resultados da avaliação da qualidade das malhas adotadas

Propriedade da malha		Valor Malha 5,7Mi	Valor Malha 3,2Mi	Valor Malha 1,6Mi	Valores recomendados ANSYS (2012c)
Qualidade ortogonal (<i>Orthogonal Quality</i>)	Valor mínimo reportado	0,06	0,07	0,07	> 0,05
	Valor médio	0,86	0,85	0,85	Ideal próximo à 1,00
	Desvio padrão	0,09	0,09	0,10	-
Assimetria (<i>Skewness</i>)	Valor médio	0,23	0,24	0,25	<0,25 excelente
	Std. deviation	0,13	0,13	0,15	-
Razão de aspecto (<i>Aspect Ratio</i>)	Valor médio	1,9	2,0	2,1	Ideal próximo à 1,00
	Std. deviation	0,8	1,0	1,3	-

Alguns parâmetros de interesse foram selecionados para analisar a independência de malha na previsão do campo de escoamento e de contaminantes. Foram selecionados: a vazão de ar envolvida nas seis faces de uma caixa virtual que engloba o

operador e a BSC; e a vazão de vazamento de contaminante da BSC através da janela. O primeiro parâmetro foi selecionado porque a previsão do escoamento nesta região do operador da BSC é fundamental nas análises de contenção. A caixa virtual envolvida nesta análise foi dimensionada com metodologia semelhante àquela adotada por MEMARZADEH (1996) para configuração do fator BLF (*box leakage factor*): trata-se de uma caixa que engloba a zona de respiração do operador da BSC, com a face a jusante localizada no plano da abertura da janela da BSC, e a face oposta localizada 0,45m a montante desta janela; A largura da caixa coincide com a largura da abertura da janela da BSC; A face horizontal inferior está no mesmo nível da mesa de trabalho da BSC, e a altura da caixa é de 0,70m. O segundo parâmetro foi selecionado porque o vazamento de contaminante através da janela da BSC, pela ação da difusão molecular e do transporte turbulento, é o parâmetro de maior importância nestas análises.

Os resultados deste teste, bem como o erro numérico associado à malha selecionada, conforme a metodologia GCI proposta por ROACHE (1996), encontram-se nas tabelas a seguir:

Tabela 7.2 Resultados do teste de refinamento de malha e avaliação do erro numérico associado – GCI method-parte 1

Número de elementos N_1, N_2, N_3	5.700.000, 3.200.000, 1.600.000			
Quantidade avaliada	$\dot{m}_{air,left}$	$\dot{m}_{air,right}$	$\dot{m}_{air,botton}$	$\dot{m}_{air,up}$
r_{21}	1,21	1,21	1,21	1,21
r_{32}	1,27	1,27	1,27	1,27
\emptyset_1	4,760E-3	1,630E-2	5,180E-2	2,060E-2
\emptyset_2	4,740E-3	1,620E-2	5,530E-2	2,130E-2
\emptyset_3	2,880E-3	1,110E-2	9,070E-2	2,630E-2
Valor extrapolado (\emptyset_{ext}^{21})	4,761E-3	1,631E-2	5,109E-2	2,040E-2
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	0,4 %	0,6 %	6,8 %	3,4 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	0,05 %	0,03 %	1,39 %	1,00 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	0,1 %	0,1 %	1,7 %	1,2 %
Valor extrapolado (\emptyset_{ext}^{32})	4,761E-3	1,631E-2	5,109E-2	2,040 E-2
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	39,2 %	31,5 %	64,0 %	23,5 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	0,4 %	0,6 %	8,2 %	4,4 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	0,5 %	0,8 %	9,5 %	5,3 %

Nota: onde $\dot{m}_{air,left}$, $\dot{m}_{air,right}$, $\dot{m}_{air,botton}$, $\dot{m}_{air,up}$: vazão de ar ($kg.s^{-1}$) através das faces esquerda, direita, inferior e superior da caixa virtual que engloba a região do operador da BSC, tal como descrita nesta seção.

Tabela 7.3 Resultados do teste de refinamento de malha e avaliação do erro numérico associado – GCI method-parte 2

Número de elementos N_1, N_2, N_3	5.700.000, 3.200.000, 1.600.000		
Quantidade avaliada	$\dot{m}_{air,front}$	$\dot{m}_{air,sash}$	$\dot{D}_{C,sash}$
r_{21}	1,21	1,21	1,21
r_{32}	1,27	1,27	1,27
ϕ_1	6,520E-2	0,13953	1,32E-5
ϕ_2	6,280E-2	0,13960	1,45E-2
ϕ_3	5,470E-2	0,13977	3,22E-5
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{21})	6,698E-2	0,13940	1,30E-5
Erro relativo aproximado (e_a^{21})	3,7 %	0,05 %	9,8 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{21})	2,65 %	0,06 %	1,5 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{21})	3,4 %	0,1 %	1,9 %
Valor extrapolado (ϕ_{ext}^{32})	6,699E-2	0,13940	1,30E-5
Erro relativo aproximado (e_a^{32})	12,9 %	0,12 %	122,1 %
Erro relativo extrapolado (e_{ext}^{32})	6,3 %	0,11 %	11,4 %
Índice de convergência (GCI_{fine}^{32})	8,3 %	0,14 %	12,8 %

Nota: onde $\dot{m}_{air,front}$, $\dot{m}_{air,sash}$: vazão de ar ($kg \cdot s^{-1}$) através da face a montante e jusante (janela da BSC) da caixa virtual que engloba a região do operador da BSC, tal como descrita nesta seção; $\dot{D}_{C,sash}$: vazamento de contaminante (SF6) através da janela da BSC, pela ação difusiva e de transporte turbulento.

7.2. RESULTADOS DO TESTE DE SENSIBILIDADE DA INTENSIDADE TURBULENTA DE *DOWNFLOW* NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Uma redução de 70% da intensidade turbulenta no fluxo de entrada de *downflow* (de 10% para 3%) foi responsável por uma redução de 1,3% no fator de vazamento da cabine (SLF, de $4,49 \times 10^{-3}$ para $4,43 \times 10^{-3}$).

7.3. RESULTADOS DO TESTE DE SENSIBILIDADE DA CARGA TÉRMICA DO LABORATÓRIO NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

A presença das fontes de calor aumentou o valor previsto do fator de vazamento de cabine (SLF) em 11% (de $4,04 \times 10^{-3}$ para $4,49 \times 10^{-3}$). Os padrões de escoamento foram modificados pela presença do empuxo térmico gerado pelas fontes de calor, e pela sua complexa interação com outros elementos, como o jato de insuflação oriundo do difusor. A velocidade média, avaliada na zona de ocupação, foi prevista em $0,21 \text{ m.s}^{-1}$ para o caso não-isotérmico (*baseline*), e $0,16 \text{ m.s}^{-1}$ para o caso isotérmico (*baseline-isothermal*). A energia cinética turbulenta (TKE) média, avaliada na zona de ocupação, aumentou em 4% com a presença das fontes de calor (de $7,5 \times 10^{-3} \text{ m}^2.\text{s}^{-2}$ para $7,8 \times 10^{-3} \text{ m}^2.\text{s}^{-2}$). Embora a variação do fator de vazamento SLF tenha sido restrita a 11%, o fator de dispersão para a sala (BLF) aumentou consideravelmente (de $4,74 \times 10^{-4}$, caso não-isotérmico, para $1,18 \times 10^{-3}$, caso isotérmico). Esta variação se deve aos diferentes padrões de escoamento que foram gerados com a presença das fontes de calor.

7.4. RESULTADOS DO TESTE DE SENSIBILIDADE DA VELOCIDADE DE *INFLOW* NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

Uma redução de 55% na velocidade de *inflow* (de $0,55 \text{ m.s}^{-1}$ para $0,25 \text{ m.s}^{-1}$) foi responsável por um aumento de 99% no fator de vazamento da cabine (SLF, de $4,04 \times 10^{-3}$ para $8,03 \times 10^{-3}$), e uma redução de 39% no fator de proteção (PF, de 1.268 para 772).

A menor velocidade de *inflow* produziu um cenário de maior vazamento de contaminante, que aumentou a concentração do mesmo na região da abertura da janela. Esta maior concentração na região da janela agiu no sentido de magnificar a remoção de contaminante através do transporte advectivo causado pelo fluxo de *inflow*. A menor velocidade de *inflow* agiu no sentido de reduzir esta remoção advectiva. O efeito global produziu um cenário no qual a concentração na região de respiração do operador aumentou em 64%, reduzindo o fator de proteção associado.

7.5. RESULTADOS DO TESTE DE SENSIBILIDADE DA TAXA DE RENOVAÇÃO DE AR NA CAPACIDADE DE CONTENÇÃO

A velocidade média, avaliada na zona de ocupação, foi reduzida em 15% (de $0,16 \text{ m.s}^{-1}$ para $0,14 \text{ m.s}^{-1}$), para uma redução de 12% da taxa de renovação (de 17 ACH para 15 ACH). Este parâmetro foi reduzido em 40% (de $0,16 \text{ m.s}^{-1}$ para $0,10 \text{ m.s}^{-1}$), quando a redução na taxa de renovação foi de 47% (de 17 ACH para 9 ACH). Estes resultados demonstram uma coerente proporcionalidade de variação, também ilustrada na figura a seguir.

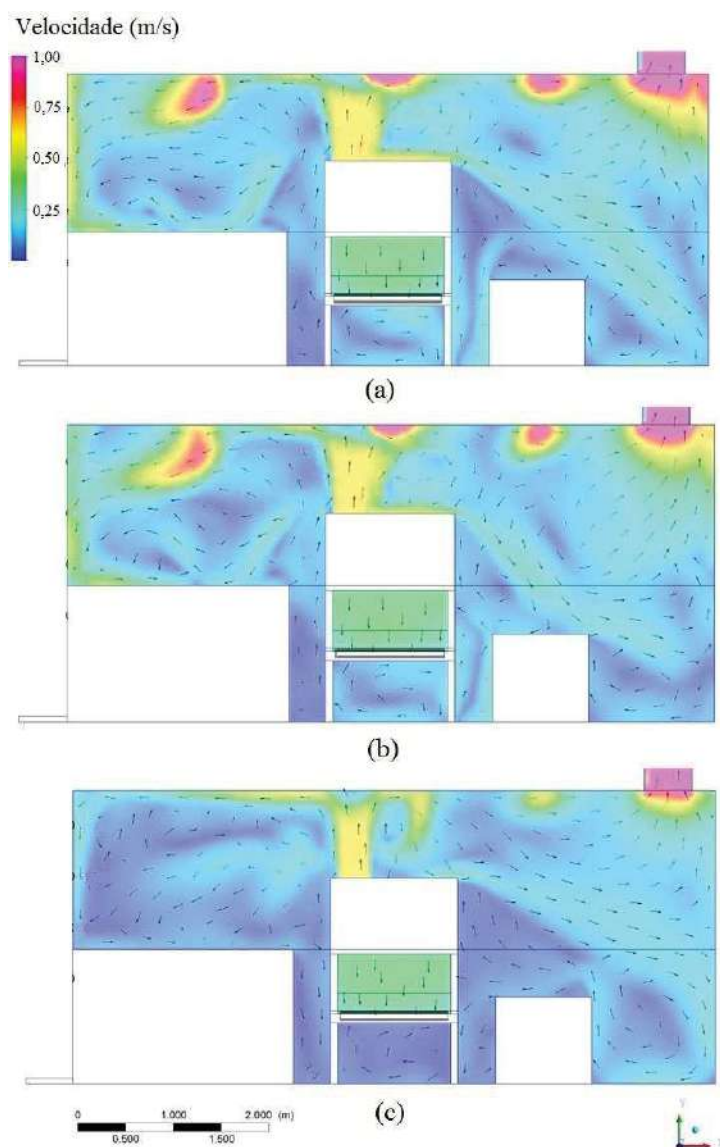


Figura 7.1 Campos de velocidade resultantes de diferentes taxas de renovação de ar no plano longitudinal de descarga da BSC ($z=0,4\text{m}$). (a) 17 ACH; (b) 15 ACH; (c) 9 ACH.

A energia cinética turbulenta (TKE) média, avaliada na zona de ocupação, reduziu em 57% (de $7,5 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$ para $3,2 \times 10^{-3} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$), do cenário com maior (17 ACH) para menor (9 ACH) taxa de renovação de ar.

Um aumento da taxa de renovação de ar de 89%, de 9 para 17 ACH, produziu um aumento do fator de vazamento da cabine (SLF) de 43% (de $2,82 \times 10^{-3}$ para $4,04 \times 10^{-3}$), e uma diminuição de 87% do fator de proteção (PF, de 9.421 para 1.268).

O aumento da taxa de renovação produziu uma redução da capacidade de contenção de contaminantes da cabine de segurança biológica (BSC), tanto para a região do operador (como verificado pelos fatores SLF e PF), quanto para o resto do laboratório (o fator de dispersão para sala, BLF, aumentou de $5,74 \times 10^{-5}$ para $1,18 \times 10^{-3}$).

A eficácia de ventilação média (ξ), avaliada na zona de ocupação, reduziu 11 % (de 1,55 para 1,37), com a redução da taxa de ventilação em 47% (de 17 para 9 ACH). Entretanto, a concentração média de contaminante desta zona foi reduzida em 92% (fração mássica reduziu de $8,72 \times 10^{-6}$ para $6,90 \times 10^{-7}$), em função do menor vazamento associado a este cenário de menor taxa de renovação (9 ACH).

A figura a seguir ilustra os campos de eficácia de ventilação (ξ), e de fração mássica de contaminantes (χ), previstos para os casos de 17 ACH, 15 ACH e 9 ACH, no plano transversal médio ($x = 3,3\text{m}$) do laboratório.

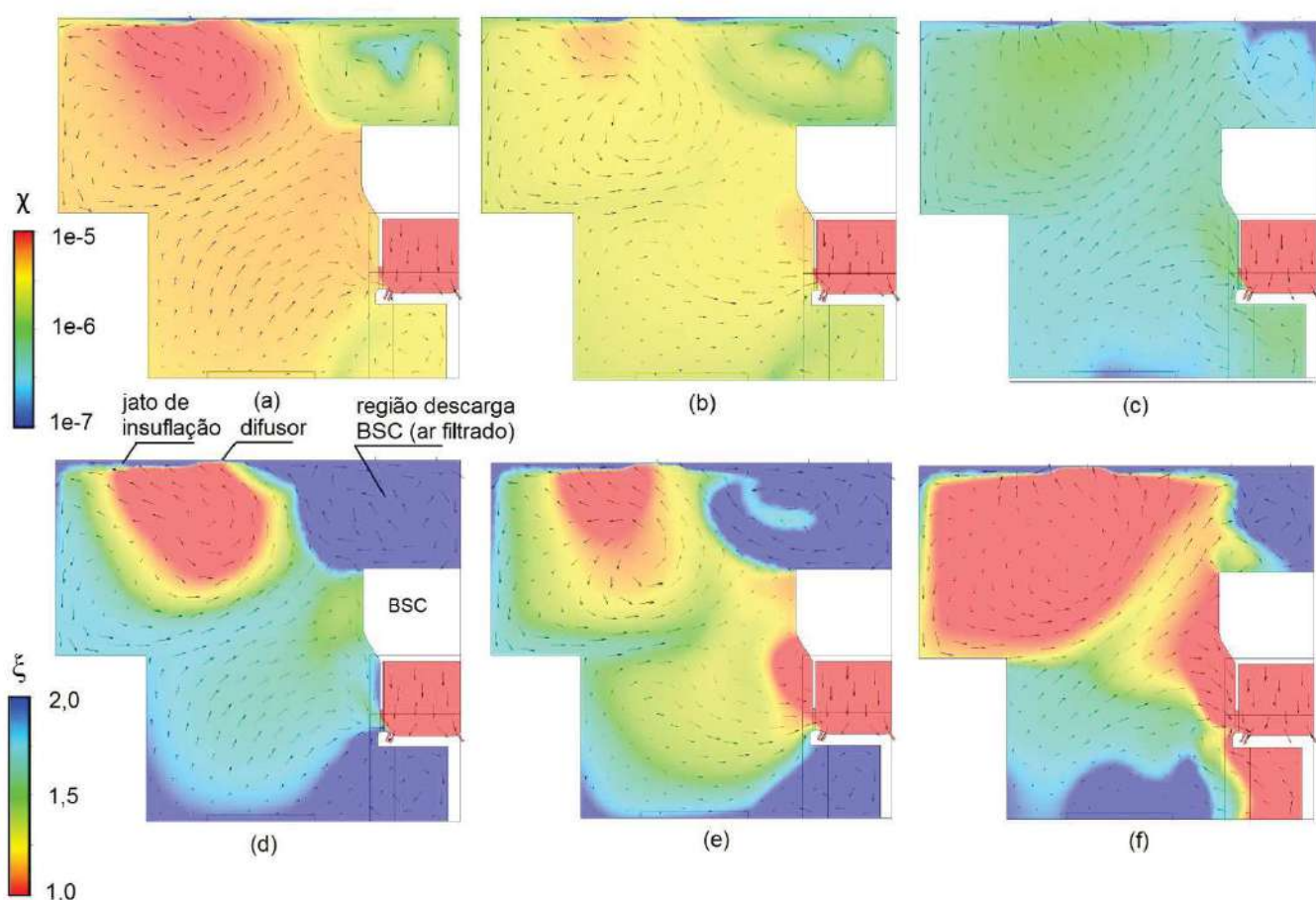


Figura 7.2 Campos de fração mássica resultantes de diferentes taxas de renovação de ar no plano transversal médio do laboratório ($x=3,3\text{m}$). (a) 17 ACH; (b) 15 ACH; (c) 9 ACH. Campos de eficácia de ventilação resultantes de diferentes taxas de renovação de ar, para o mesmo plano. (d) 17 ACH; (e) 15 ACH; (f) 9 ACH.

7.6. RESULTADOS DA ANÁLISE DA ESCALA DE TEMPO ASSOCIADA AO VAZAMENTO DE CONTAMINANTE DO INTERIOR DA BSC À ZONA DE RESPIRAÇÃO DO OPERADOR

Os resultados da concentração de contaminante na região da respiração do operador ($h=1,20\text{m}$ do piso, distância de $0,15\text{m}$ da cabine), bem como na região da abertura da janela da BSC, para a simulação transiente, encontram-se na figura a seguir.

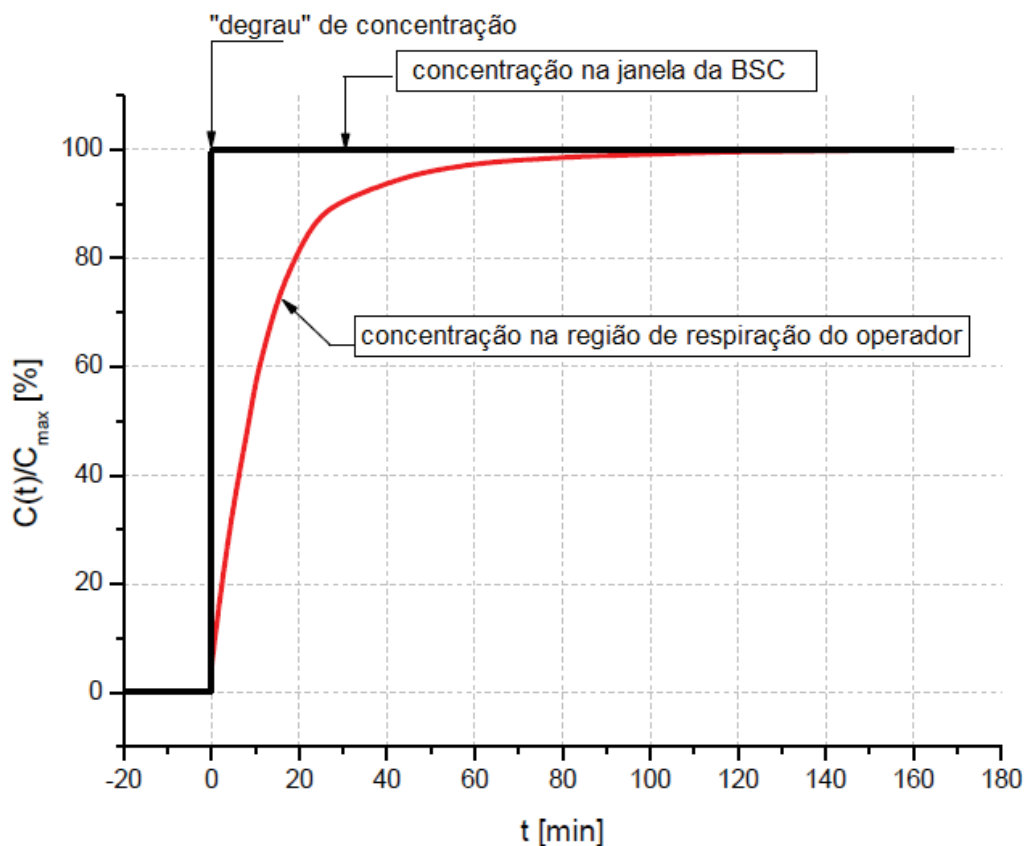


Figura 7.3 Resultados do teste transiente de concentração de contaminante.

Os resultados estão apresentados em termos de uma concentração adimensionalizada, dada por $c(t)/c_{max}$, onde c_{max} é a concentração máxima, atingida ao final do teste transiente.

Os resultados demonstram que a ordem de grandeza do tempo necessário a se atingir uma condição de regime permanente é de 1 hora. Entretanto, a concentração na região da abertura da janela aumenta instantaneamente, indicando que o vazamento de contaminantes, promovido pelo transporte turbulento, pode ser iniciado a partir de um período muito curto de tempo.

Apesar do intervalo de tempo associado à obtenção do regime permanente ser relativamente longo, os resultados da figura anterior demonstram que 90% da concentração final na região de respiração do operador é atingida dentro de um intervalo de tempo de exposição de 30 minutos.

7.7. ANÁLISES DOS RESULTADOS

As simulações associadas aos testes de sensibilidade envolvem complexidade inerente ao escoamento tridimensional em um domínio com geometria assimétrica e não trivial. A interação dos jatos de ar, oriundos do difusor de insuflação, com o jato de descarga da cabine de segurança biológica (BSC) e com as plumas térmicas (nos casos não-isotérmicos) agregam complexidade à simulação dos campos de escoamento resultantes. As aproximações associadas à discretização do domínio, aos modelos de turbulência, ao uso das funções de parede (*wall functions*), podem, em conjunto com as incertezas associadas aos valores das condições de contorno, prejudicar a acurácia dos resultados obtidos. A validação através do *benchmark* sobre laboratório de JIN *et al* (2012), com complexidade similar, demonstrou que podem ser obtidos resultados aceitáveis sobre a aerodispersão de um contaminante em laboratórios através da modelagem com a técnica CFD, apesar de todas estas aproximações.

Os resultados dos testes de sensibilidade demonstram que a capacidade da BSC na contenção dos contaminantes aerodispersóides gerados em seu interior apresenta uma correlação com a intensidade de turbulência do laboratório aonde a mesma se encontra. Casos com maior valor médio da energia cinética turbulenta (TKE) também apresentaram um maior fator de vazamento de cabine (SLF, *sash leakage factor*). A intensidade de turbulência do fluxo de *downflow* não parece representar, isoladamente, uma parcela relevante de contribuição para esta situação, como demonstram os resultados do teste associado, apresentados na seção 7.2. A energia turbulenta da sala, que é transportada para a janela da cabine, através da advecção causada pelo fluxo de *inflow*, apresenta uma maior contribuição no vazamento da cabine. Conclusões similares sobre o papel da turbulência da sala e a influência de sua advecção pelo fluxo de *inflow*, na capacidade de contenção, foram verificadas por MEMARZADEH (1996), em seu trabalho sobre a contenção de capelas de exaustão química. Medições experimentais realizadas pela ASHRAE (2009), em seu *benchmark*, podem permitir uma avaliação da ordem de grandeza da TKE associada ao escoamento do ar em um ambiente interno, dotado de ventilação mecânica. Calculando-se a média dos valores de TKE medidos

pela ASHRAE (2009) em 104 pontos distribuídos pela região interna de seu *benchmark* (fora da região do jato de insuflação) produz um valor de $6,0 \times 10^{-3} m^2.s^{-2}$. Este valor pertence à mesma ordem de grandeza da TKE prevista pelas simulações desta tese para a zona de ocupação.

Uma avaliação complementar do desempenho de contenção pode ser realizada pela comparação do caso *baseline* desta tese com o desempenho do caso 191 do trabalho de MEMARZADEH (1996). As características e condições operacionais do caso *baseline* desta tese, identificadas no capítulo 6, são similares às do caso 191 de MEMARZADEH (1996), com a exceção do equipamento de contenção associado. Esta tese se propôs a estudar o desempenho de contenção de cabines de segurança biológica (BSC), enquanto que o trabalho de MEMARZADEH (1996) se propôs a estudar o desempenho de capelas de exaustão, e algumas diferenças surgem em função das diferentes particularidades de cada equipamento. A diferença do valor previsto de SLF (*sash leakage factor*) para o caso *baseline* desta tese (seção 7.3), e por MEMARZADEH (1996), para seu caso 191, é de 28%. Excluindo-se diferenças de modelagem, o pior desempenho de contenção da BSC em relação à capela de exaustão pode ser explicado pelos termos-fonte de quantidade de movimento associados aos fluxos de downflow e de descarga que estão presentes na BSC, mas que não existem no caso da capela. Estas diferentes configurações, ilustradas na figura a seguir, promovem diferentes padrões de escoamento. Entretanto, a ordem de grandeza de SLF da BSC é a mesma da capela (CEQ).

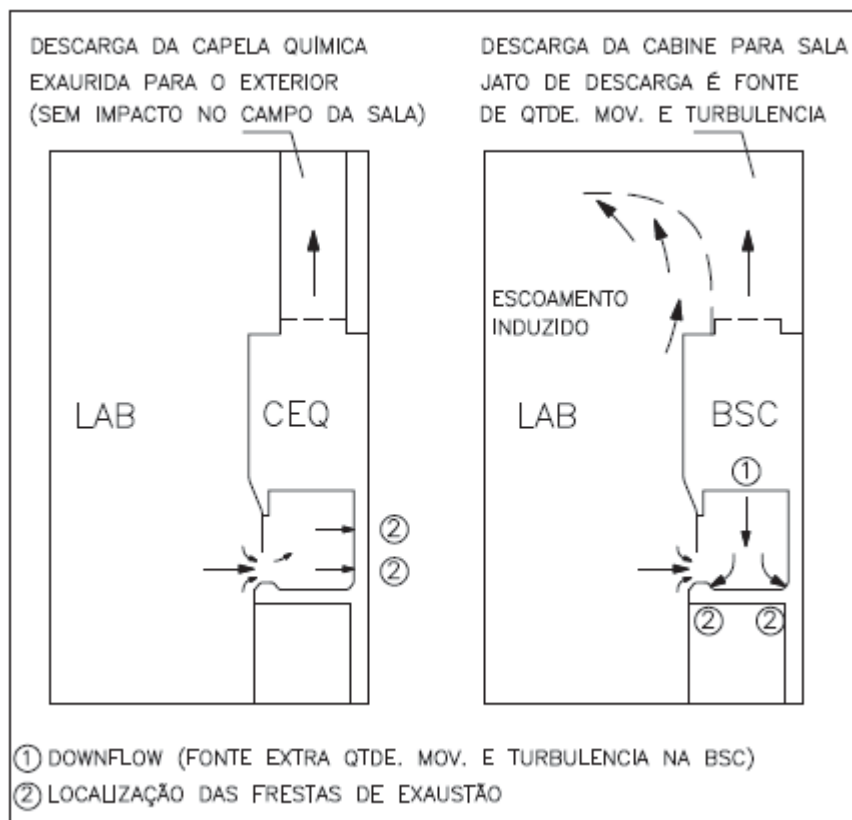


Figura 7.4 Diferenças nas configurações dos fluxos operacionais das capelas de exaustão e das cabines de segurança biológica classe II-A2.

Os resultados apresentados na seção 7.4 demonstram que a velocidade de *inflow* é um parâmetro de extrema importância na capacidade da BSC de contenção dos contaminantes aerodispersóides gerados em seu interior. O cenário testado de reduzida velocidade de *inflow* pode ocorrer em laboratórios reais, quando da saturação do filtro HEPA⁵ de descarga da BSC. A vazão de descarga governa a velocidade de *inflow*, e a saturação do filtro promove a modificação do ponto de operação do ventilador para uma vazão menor do que a projetada. Este cenário acabará ocorrendo, na eventualidade do filtro não ser substituído em tempo hábil. Verifica-se que o monitoramento de saturação do filtro da BSC é um protocolo de extrema importância na segurança ocupacional dos usuários de laboratórios com biossegurança. Os equipamento modernos já possuem

⁵ *High efficiency particulate air filter* – apresenta eficiência mínima de 99,97% para as partículas de 0,3 μm (*most penetrating particle size* – MPPS)

alarmes que indicam a saturação de seus filtros. Os resultados obtidos por MEMARZADEH (1996) sobre o impacto da velocidade de *inflow* na contenção das capelas de exaustão foram diferentes. Seus testes foram conduzidos em um laboratório com maiores dimensões, e os resultados foram de que o fator SLF era reduzido com uma menor velocidade de *inflow*. Entretanto, a capacidade de advecção de contaminantes era prejudicada, e suas conclusões foram de que esta menor velocidade de *inflow* só poderia ser utilizada, para o caso das capelas de exaustão, em períodos desocupados. Esta diferença de desempenho pode ser explicada pelos diferentes padrões de escoamento associados aos dois equipamentos analisados, BSC e capela. Conforme ilustrado na figura anterior, a BSC possui um fluxo interno de *downflow*, inexistente na capela de exaustão. Além disto, os cenários testados nesta tese, com diferentes velocidades de *inflow*, foram modelados com a mesma velocidade de *downflow*. A abrupta redução de capacidade de contenção no cenário de menor velocidade de *inflow* pode estar relacionada a um desequilíbrio provocado pela diferente relação entre os fluxos de *inflow* e *downflow*.

A análise qualitativa da figura 7.2-d,e,f, e quantitativa dos resultados da seção 7.5, permitem verificar que a eficácia média de ventilação (ξ) foi reduzida com a redução da taxa de renovação de ar do laboratório. Entretanto, a redução da taxa de movimentação também produziu uma considerável redução do nível de contaminação da sala, como pode ser verificado pela redução da fração mássica de contaminantes apresentada na figura 7.2-a,b,c, e nos resultados da seção 7.5. A eficácia de ventilação foi reduzida porque a advecção de contaminantes foi menos efetiva no cenário com menor taxa de movimentação do ar. Entretanto, a menor intensidade de turbulência associada produziu um menor vazamento de contaminantes neste cenário com menor taxa de movimentação do ar. Este menor vazamento produziu uma menor fonte de contaminantes para a sala, resultando num menor nível de contaminação da mesma (menor concentração de contaminantes). Estes resultados demonstram que o uso de maiores taxas de ventilação não estará necessariamente associado a um aumento da segurança ocupacional, porque a maior intensidade de turbulência associada pode reduzir a capacidade da BSC na contenção dos contaminantes aerodispersóides gerados em seu interior. Os testes conduzidos por MEMARZADEH (1996) sobre a correlação entre taxa de ventilação e capacidade de contenção das capelas de exaustão foram

menos conclusivos, dado que foram verificados mesmos fatores de contenção para diferentes taxas de movimentação. Entretanto, MEMARZADEH (1996) menciona que esta situação pode estar associada a um espaço amostral restrito, em termos de configurações. Observa-se, pela análise do seu modelo, que a vazão fixa de exaustão, demandada pela capela, pode ter prejudicado a análise de sensibilidade da taxa de ventilação. Como esse teste foi conduzido no modelo de laboratório de menor escala, e como a demanda de exaustão era fixa, independente da taxa de ventilação testada, um fluxo de infiltração, através de uma grelha de transferência, precisou ser modelado nos casos de menor vazão, para garantia da continuidade. Apesar da redução da vazão de ar insuflado, a taxa de ventilação do laboratório era basicamente a mesma, com a diferença de que parte da vazão total passava a entrar pela grelha de transferência, e não pelo difusor. Já as simulações desta tese puderam modelar efetivas reduções da taxa de ventilação da sala, já que a operação da BSC é totalmente desacoplada da operação do sistema de ventilação da sala. Por esta razão, os resultados destes testes, para a BSC, são diferentes dos resultados obtidos por MEMARZADEH (1996) para o caso das capelas de exaustão. Para a plenitude desta análise, torna-se necessário enfatizar algumas diferenças fundamentais entre os cenários testados e um cenário idealizado. O aumento da taxa de ventilação promove a redução da concentração resultante, em um cenário idealizado de ventilação de uma sala com mistura perfeita, e com uma fonte de contaminantes constante. Para os cenários testados nesta tese, entretanto, o aumento da taxa de ventilação produziu uma maior fonte de contaminantes (maior vazamento de contaminantes para a sala), e esta é a principal diferença entre o desempenho destes cenários para um caso idealizado.

Os resultados da simulação transiente, apresentados na seção 7.6, produzem informação sobre a ordem de grandeza do tempo associado ao transporte de um contaminante gerado no interior da BSC à zona de respiração do operador, após o estabelecimento de um aumento na concentração no interior da BSC (degrau). Os resultados demonstram que é necessário um intervalo da ordem de 1 hora para o estabelecimento de uma concentração máxima na região do operador. Entretanto, os resultados produzem uma estimativa de que, em aproximadamente 30 minutos, a concentração nesta região já atinja 90% deste valor máximo. Este valor máximo depende da capacidade da BSC na contenção dos contaminantes aerodispersóides

gerados em seu interior. Os resultados desta tese demonstraram que esta capacidade é influenciada pelos padrões de escoamento e pela intensidade de turbulência da sala aonde a BSC está instalada. O conhecimento do fator de proteção (PF) do equipamento permite uma avaliação desta máxima concentração, para uma determinada taxa de geração de contaminantes, e este dado pode ser útil na estimativa da dose de exposição à qual o operador estará submetido.

8. CONCLUSÕES

Esta tese se propôs a estudar o transporte de contaminantes aerodispersóides em laboratórios com nível de biossegurança (BSL-2 e BSL-3). A dimensão característica dos aerodispersóides estudados foi definida em função de critérios de maior capacidade de aerodispersão (menor taxa de deposição e captura), maior probabilidade de penetração nas vias aéreas inferiores e ampla representatividade estatística nos casos reportados de infecção adquirida em laboratórios. Estes critérios levaram à definição da ordem de grandeza de $1\mu\text{m}$, para representação do diâmetro característico estudado.

Adotou-se a premissa de que a geração destes aerodispersóides se dá no interior da cabine de segurança biológica (BSC) do laboratório, dado que os protocolos nacionais e internacionais exigem a aplicação deste tipo de equipamento de proteção para a realização de procedimentos com potencial de aerossolização de amostras infecciosas. A capacidade de contenção deste tipo de equipamento é um fator fundamental na minimização da aerodispersão destes contaminantes para o laboratório, e por este motivo, este estudo foi focado nesta capacidade de contenção. Foram definidos fatores que permitiram quantificar a capacidade de contenção da BSC, de modo a possibilitar a realização de testes comparativos de desempenho. Estes testes foram desenvolvidos para avaliar a sensibilidade do desempenho de contenção a diferentes padrões de escoamento do ar, resultantes de variações nas condições de contorno impostas.

A simulação numérica, utilizando-se a técnica de CFD foi selecionada para condução das análises desta tese, em função das restrições impostas pelo custo e complexidade dos estudos experimentais. Previamente às análises principais desta tese, três códigos CFD foram testados e validados, para a seleção do código utilizado nestas

análises. A pesquisa bibliográfica permitiu a seleção de três *benchmarks*, relacionados à aplicação do escoamento do ar em ambientes internos de laboratórios e hospitais. A modelagem numérica destes *benchmarks* produziu resultados das variáveis de campo associadas ao transporte advectivo e difusivo de contaminantes aerodispersóides. A comparação destes resultados numéricos com os dados experimentais permitiu verificar que os códigos CFD produziram resultados aceitáveis sobre a modelagem deste transporte em um laboratório com ventilação por mistura, e marginalmente aceitáveis sobre a modelagem deste transporte em um quarto hospitalar com ventilação por deslocamento positivo. Observou-se que o desempenho deste último caso na simulação da eficácia de ventilação foi prejudicado pelo tratamento de parede com o uso de funções de parede (*wall functions*). Esta modelagem promove inacurácia na simulação da transferência de calor nas paredes e, portanto, nos gradientes de temperatura. Esta situação prejudicou a simulação da eficácia deste modo de ventilação, que é intensamente associada ao transporte produzido por estes gradientes de temperatura. Recomenda-se que trabalhos futuros voltados ao modo de deslocamento positivo utilizem a modelagem da transferência de calor nas paredes através da especificação do coeficiente de transferência de calor por convecção.

Além da validação dos códigos ANSYS FLUENT, e ANSYS CFX, de uso já consagrado, o estudo comparativo do desempenho destes códigos também permitiu a validação do código CONTAM/CFD-0 para os benchmarks de ventilação da ASHRAE (2009), de ventilação de laboratórios (JIN *et al*, 2012) e de ventilação de quartos hospitalares (YIN *et al*, 2009). Este código, de uso gratuito, foi desenvolvido pelo NIST especialmente para o estudo do transporte de contaminantes pelo sistema de ventilação. Considera-se que estes resultados, bem como a análise de seu desempenho, produzem informações que são úteis aos usuários e desenvolvedores deste código.

Após a seleção do código ANSYS FLUENT (versão 14.5), o mesmo foi utilizado para condução das simulações principais desta tese, que produziram as seguintes informações:

- A capacidade da BSC na contenção dos contaminantes aerodispersóides gerados em seu interior apresenta uma correlação com a intensidade de turbulência do

laboratório aonde a mesma se encontra. O aumento da intensidade de turbulência produz a redução desta capacidade de contenção;

- A velocidade de *inflow* associada à operação da BSC é um parâmetro de extrema importância na sua capacidade de contenção. A saturação do filtro HEPA de descarga da cabine pode minimizar esta velocidade, resultando em perda de contenção. Os protocolos devem primar pelo rigoroso controle deste parâmetro e da saturação deste filtro;
- O uso de maiores taxas de ventilação, em um laboratório com ventilação por mistura, não estará necessariamente relacionado a um aumento da segurança ocupacional, porque a maior intensidade de turbulência associada pode reduzir a capacidade da BSC na contenção dos contaminantes aerodispersóides gerados em seu interior. O uso de taxas de ventilação excessivas também produz um considerável impacto no consumo energético da edificação;
- Foi estimada a ordem de grandeza do tempo associado ao transporte de um contaminante gerado no interior da BSC à zona de respiração do operador, após o estabelecimento de um aumento na concentração no interior da BSC (degrau). Os resultados demonstram que é necessário um intervalo da ordem de 1 hora para o estabelecimento de uma concentração máxima na região do operador. Entretanto, os resultados produzem uma estimativa de que, em aproximadamente 30 minutos, a concentração nesta região já atinja 90% deste valor máximo.

Trabalhos futuros podem ser conduzidos para testar diferentes configurações de laboratórios, de modos de ventilação, e de classes de cabines (ex. BSC classe II-B2). Também podem ser conduzidos trabalhos que procurem estimar a ordem de grandeza da taxa de geração de contaminantes que está associada aos procedimentos laboratoriais mais comuns. A quantificação desta taxa de geração permitirá, em conjunto com as informações sobre o fator de proteção (PF, desta tese ou de outros trabalhos), estimar a dose de exposição associada aos procedimentos. Estes dados podem ser utilizados em uma análise de riscos ocupacionais, para uma ambiente real similar, em função dos parâmetros obtidos para estes modelos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT-ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS, 2005, **Tratamento de ar em estabelecimentos assistenciais de saúde (EAS)-Requisitos para projeto e execução das instalações**. Norma 7256.

ACGIH, 2013, *Industrial Ventilation: A Manual of Recommended Practice for Design*, 28th edition, Ohio, American Conference of Governmental Industrial Hygienists.

AIAA, 1998, *Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations*. Standard G-077-1998, American Institute of Aeronautics and Astronautics.

ANSI / AIHA / ASSE, 2012, *Laboratory Ventilation*. Standard Z 9.5.

ANSI / ASHE / ASHRAE, 2013, *Ventilation of Health Care Facilities*. Standard 170.

ANSI / ASHRAE / IESNA, 2004, *Energy Standard for Buildings Except Low-Rise Residential Buildings*. Standard 90.1.

ANSYS, 2012a. **ANSYS CFX-Pre User's Guide**. Canonsburg, PA, ANSYS Inc.

ANSYS, 2012b. **ANSYS FLUENT User's Guide**. Canonsburg, PA, ANSYS Inc.

ANSYS, 2012c. **ANSYS WORKBENCH User's Manual**. Canonsburg, PA, ANSYS Inc.

ANVISA-AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA, 2002, **Regulamento Técnico para planejamento, elaboração e avaliação de projetos físicos de estabelecimentos assistenciais de saúde**. Resolução RDC n°50.

ANVISA-AGÊNCIA NACIONAL DE VIGILÂNCIA SANITÁRIA, 2003, **Padrões Referenciais de qualidade do ar interior em ambientes climatizados artificialmente de uso público e coletivo**. Resolução RE n°9.

ASHRAE, 2000, "Air Cleaners for Particulate Contaminants". In: *Handbook of Systems and Equipment*, Chapter 24, Atlanta, American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers, Inc.

ASHRAE, 2001a, "Space Air Diffusion". In: *Handbook of Fundamentals*, Chapter 32, Atlanta, American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers, Inc.

ASHRAE, 2001b, "Air Contaminants". In: *Handbook of Fundamentals*, Chapter 12, Atlanta, American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers, Inc.

ASHRAE, 2003, "Laboratories". In: *Handbook of Applications*, Chapter 14, Atlanta, American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers, Inc.

ASHRAE, 2009, ***Modeling Low Velocity Large Scale Fluctuating Flows in Ventilated Spaces at Transitional Reynolds Number***, Research Project RP-1271, Atlanta, Ashrae Inc.

ASHRAE, 2007, ***Method of Testing General Ventilation Air-Cleaning Devices for Removal Efficiency by Particle Size***. Standard 52.2.

ASHRAE, 2013a, ***HVAC Design Manual for Hospitals and Clinics***, 2nd edition, Atlanta, Ashrae Inc.

ASHRAE, 2013b, "Indoor Environmental Modeling". In: *Handbook of Fundamentals*, Chapter 13, Atlanta, American Society of Heating, Refrigeration and Air-Conditioning Engineers, Inc.

ASHRAE, 2014, ***ASHRAE Position Document on Airborne Infectious Diseases***, Atlanta, Ashrae Inc.

BAKER, K., 2002, ***Na Bancada-Manual de Iniciação Científica em Laboratórios de Pesquisas Biomédicas***, Rio de Janeiro, Editora Artmed.

BELL, G. C., 2008. Optimizing laboratory ventilation rates. Laboratories for The 21st Century Best Practice Guide. Disponível em: http://www.labs21century.gov/toolkit/bp_guide.htm, acesso em 18 Abril 2017.

BENNETT, J., JONES, B. W., HOSNI, M. H., ZHANG, Y., TOPMILLER, J. L., DIETRICH, W. L. 2013, "Airborne Exposure Patterns from a Passenger Source in Aircraft Cabins", ***HVAC&R Research***, Vol.19, pp. 962-973, 2013.

BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N., 2002, ***Transport Phenomena***, 2nd edition, New York, John Wiley & Sons Inc.

BOLASHIKOV, Z. D., MELIKOV, A. K., KIERAT, W., POPIOLEK, Z., BRAND, M. 2013, "Exposure of Health Care Workers and Occupants to Coughed Airborne Pathogens in a Double-Bed Hospital Patient Room With Overhead Mixing Ventilation", ***HVAC&R Research***, Vol.18 (4), pp. 602-615, 2012.

BRASIL. Lei nº. 8.974, de 5 de janeiro de 1995. Estabelece o uso de normas técnicas de engenharia genética e liberação no meio-ambiente de organismos geneticamente modificados, autoriza o Poder Executivo a criar, no âmbito da Presidência da República, a Comissão Técnica Nacional de Biossegurança, e dá outras providências. Diário

Oficial da República Federativa do Brasil, Brasília, 6 de janeiro de 1995. Seção 1, PP. 337-46

BURROUGHS, H. E., HANSEN, S. J., 2008, *Managing Indoor Air Quality*, 4th edition, Lilburn, Fairmont Press.

CAPLAN, K., KNUSTON, G., 1978, "Laboratory Fume Hoods: Influence of Air Supply", *ASHRAE Transactions*, 84.

CDC 2003. **Guidelines for Environmental Infection Control in Health-Care Facilities**. Atlanta, Centers for Disease Control and Prevention.

CDC, NIH 2007. **Biosafety in Microbiological and Biomedical Laboratories**. Washington, 5th ed., United States Government Printing Office.

CELIK, I. B., GHIA, U., ROACHE, P. J., FREITAS, C. J., COLEMAN, H. 2008, "Procedure for Estimation and Reporting of Uncertainty Due to Discretization in CFD Applications", *ASME Journal of Fluids Engineering*, Vol.130 (7), pp. XXX-XXX, 2008.

CHEN, Q., 1997, "Computational Fluid Dynamics for HVAC: Successes and Failures.", *ASHRAE Transactions*, 103 (1), pp. 178-187.

CHEN, C., ZHU, J., QU, Z., LIN, C. H., JIANG, Z., CHEN, Q. 2014, "Systematic Study of Person-to-Person Contaminant Transport in Mechanically Ventilated Spaces (RP-1458)", *HVAC&R Research*, Vol.20, pp. 80-91, 2014.

CHUAH, Y. K., HUNG, C. C., TSENG, P. C., 1998, "Experiments on the Dehumidification Performance of a Finned Tube Heat Exchanger", *HVAC&R Research*, Vol.4, n°2, pp. 167-178, Abril 1998.

CRANE, J. T., RILEY, J. F., 1997. "Design Issues in the Comprehensive BSL-2 and BSL-3 Laboratory". In: Richmond, J., Y., (Ed.), *Designing Modern Microbiological / Biomedical Labs*, chapter 5, Washington, American Public Health Association.

DAVIDSON, L., NIELSEN, P.V., SVENINGSSON, A. 2003, "Modification of the v2f Model for Computing the Flow in a 3D Wall Jet", *Turbulence, Heat and Mass Transfer*, Vol.4, pp. 577-584, 2003.

DAVIDSON, L., SCHÄLING, A., 2001. "Design with Modeling Techniques: Computational Fluid Dynamics in Industrial Ventilation". In: Goodfellow, H., Tähti, E., (Ed.), *Industrial Ventilation Design Guidebook*, chapter 14, San Diego, Academic Press.

DELUGA, G. F., 1997. "Designing Laboratory Ventilation". In: Richmond, J., Y., (Ed.), *Designing Modern Microbiological / Biomedical Labs*, chapter 8, Washington, American Public Health Association.

DI BERARDINIS, L. J., BAUM, J. S., FIRST, M. W., GATWOOD, G. T., SETH, A. K. 2013, **Guidelines for Laboratory Design: Health, Safety, and Environmental Considerations**, 4th edition, New Jersey, John Wiley & Sons Inc.

EICKHOFF, T. C. 1996, "Airborne Disease: Including Chemical and Biological Warfare", *American Journal of Epidemiology*, Vol.144 (8), pp. S39-S46, 1996.

EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION, 2002, *European Standard for Coarse and Fine Filters*. Standard EN779.

EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION, 2009, *Test Methods for EPA/HEPA/ULPA Filters*. Standard EN1822.

FAULKNER, W. B., MEMARZADEH, F., RISKOWSKI, G., HAMILTON, K., CHANG, C. Z., CHANG, J. R. 2013, "Particulate Concentrations Within a Reduced-Scale Room Operated at Various Air Exchanges Rates", *Building and Environment*, Vol.65, pp. 71-80, 2013.

FRENZE, D., GREENSBURG, S., MATHEW, P., SARTOR, D., STARR, W., 2005. Right-sizing Laboratory Equipment Loads. Laboratories for The 21st Century Best Practice Guide. Disponível em: http://www.labs21century.gov/toolkit/bp_guide.htm, acesso em 18 Abril 2017.

FRIEDLANDER, S. K., 2000, *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Dynamics*, 2nd edition, New York, Oxford University Press.

GIL-LOPEZ, T., CASTEJON-NAVAS, J., GALVEZ-HUERTA, M. A., GOMEZ-GARCIA, V. 2013, "Predicted Percentage of Dissatisfied and Air Age Relationship in Ventilation Systems: Applications to a Laboratory", *HVAC&R Research*, Vol.19, pp. 76-86, 2013.

GROSSKOPF, K. R., HERSTEIN, K. R. 2012, "The Aerodynamic Behavior of Respiratory Aerosols Within a General Patient Room", *HVAC&R Research*, Vol.18 (4), pp. 709-722, 2012.

HOWELL, R. H., SAUER Jr., H. J., COAD, W. J., 2005, *Principles of Heating, Ventilation and Air Conditioning*, Atlanta, Ashrae Inc.

ISO, 1994, *Moderate Thermal Environments – Determination of the PMV and PPD indices and Specification of the Conditions for Thermal Comfort*. Standard 7730.

JIANG, J., SUN, Y., WANG, X., ZHANG, Y., 2009, "Experimental and Numerical Study of Airflows in a Full-Scale Room", *ASHRAE Transactions*, 115(2).

JIN, M., MEMARZADEH, F., LEE, K., CHEN, Q. 2012, "Experimental Study of Ventilation Performance in Laboratories with Chemical Spill", *Building and Environment*, Vol.57, pp. 327-335, 2012.

KAMEEL, R., KHALIL, E., 2003, *The Prediction of Airflow Regimes in Surgical Operation Theatres: A Comparison of Different Turbulence Models*, AIAA-2003-859, Reston, The American Institute of Aeronautics and Astronautics.

KOLESNIKOV, A. 2006, "Use of Computational Fluid Dynamics to Predict Airflow and Contamination Concentration Profiles Within Laboratory Floor Plant Environment", *Applied Biosafety*, Vol.11 (4), pp. 197-214, 2006.

KENNY, M. T., SABEL, F. L. 1968, "Particle Size Distribution of *Serratia Marcescens* Aerosol Created During Common Laboratory Procedures and Simulated Laboratory Accidents", *Applied Microbiology*, Vol.16, pp. 1146-1150, Agosto 1968.

- KLOTE, J. H., MILKE, J. A., TURNBULL, P. G., KASHEF, A., PEREIRA, M. J., 2012, **Handbook of Smoke Control Engineering**, Atlanta, Ashrae Inc.
- KUNDU, P. K., COHEN, I. M., DOWLING, D. R., 2012, **Fluid Mechanics**, 5th ed., Oxford, Elsevier.
- KUPSKAY, B. 2002, "Risk Assessment for Enteric Pathogens in the Biosafety Level 2 Laboratory", **Applied Biosafety**, Vol.7(3), pp. 120-132, 2002.
- LAM, C.K.G., BREMHORST, K. 1981, "A Modified Form of the κ - ϵ Model for Predicting Wall Turbulence", **Journal of Fluids Engineering**, Vol.103, pp. 456-460, 1981.
- LAUNDER, B.E., SPALDING, D.B. 1974, "The Numerical Computation of Turbulent Flows", **Computer Methods in Applied Mechanics and Energy**, Vol.3, pp. 269-289, 1974.
- LAUNDER, B.E., SHARMA, B.I. 1974, "Application of the Energy-Dissipation Model of Turbulence to the Calculation of Flow Near a Spinning Disc", **Letters in Heat and Mass Transfer**, Vol.1(2), pp. 131-137, 1974.
- LAURENCE BERKELEY NATIONAL LABORATORY , High Performance Buildings for High-Tech Industries. Disponível em: <http://hightech.lbl.gov/fh-calc.html> , Acesso em 10 Maio 2011.
- LI, Y., LEUNG, G.M., TANG, J.W., YANG, X., CHAO, C., LIN, J.Z., LU, J.W., NIELSEN, P.V., NIU J., QIAN, H., SLEIGH, A.C., SU, H.J. SUNDELL, J., WONG, T.W., YEUN, P.L. 2007, "Role of Ventilation in Airborne Transmission of Infectious Agents in the Built Environment – A Multidisciplinary Systematic Review", **Indoor Air**, Vol.17(1), pp. 2-18, 2007.
- LIANG, H., 1994, *Room Air Movement and Contaminant Transport*. Tese de P.hD., Department of Mechanical Engineer, University of Minnesota, Minneapolis, MN, Estados Unidos.
- LOOMANS, M., 1998, *The Measurement and Simulation of Indoor Air Flow*. Tese de D.Sc., Technische Universiteit Eindhoven, Eindhoven, Holanda.
- MEMARZADEH, F., 1996, "**Methodology for Optimization of Laboratory Hood Conatinnment**", Bethesda, ORF Publication.
- MEMARZADEH, F., 1998, "**Ventilation Design Handbook on animal research facilities using static Microisolators**", Bethesda, ORF Publication.
- MEMARZADEH, F. 2009, "Effect of Reducing Ventilation Rate on Indoor Air Quality and Energy Costs in Laboratory", **Journal of Chemical Health & Safety**, Vol.16 (5), pp. 20-26, 2009.
- MEMARZADEH, F., XU, W. 2012, "Role of Air Changes per Hour (ACH) in Possible Transmission of Airborne Infections", **Building Simulation**, Vol.5, pp. 15-28, 2012.
- MEMARZADEH, F., 2013, **Literature Review: Room Ventilation and Airborne Disease Transmission**, Chicago, The American Society for Healthcare Engineering.

MENTER, F.R.. 1994, “Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications”, **AIHAA journal**, Vol.32, pp. 1598-1605, 1994.

Ministério da Saúde, 2000. **Biossegurança em Laboratório Biomédicos e de Microbiologia**. Brasília, Fundação Nacional de Saúde, Editora do Ministério da Saúde.

Ministério da Saúde, 2010. **Classificação de risco dos agentes biológicos**. Brasília, 2ª. ed., Secretaria de Ciência, Tecnologia e Insumos Estratégicos, Editora do Ministério da Saúde.

Ministério do Trabalho, 1978, **Atividades e Operações Insalubres**. Norma Regulamentadora nº15.

MORAWSKA, L. 2006, “*Droplet Fate in Indoor Environments, or Can We Prevent the Spread of Infection?*”, **Indoor Air**, Vol.16, pp. 335-347, 2006.

MUI, K. W., WONG, L. T., WU, C. L., LAI, A. C. K. 2009, “*Numerical Modeling of Exhaled Droplet Nuclei Dispersion and Mixing in Indoor Environments*”, **Journal of Hazardous Materials**, Vol.167, pp.736-744, 2009.

NATIONAL INSTITUTES OF HEALTH, 2016, **NIH Design Requirements Manual**, Bethesda, Division of Technical Resources.

NAZAROFF, W.W. 2004, “*Indoor Particle Dynamics*”, **Indoor Air**, Vol.14 (Supp 7), pp. 175-183, 2004.

NEUENSCHWANDER, W., 1997. “*Designing for the Facilities Staff*”. In: Richmond, J., Y., (Ed.), *Designing Modern Microbiological / Biomedical Labs*, chapter 3, Washington, American Public Health Association.

NFPA, 2011, **Fire Protection for Laboratories Using Chemicals**. Standard nº45

NICAS, M., NAZAROFF, W. W., HUBBARD, A. 2005, “*Toward Understanding the Risk of Secondary Airborne Infection: Emission of Respirable Pathogens*”, **Journal of Occupational and Environmental Hygiene**, Vol.2, pp. 143-154, 2005.

NIELSEN, P. V., 1998, “*The Selection of Turbulence Models for Prediction of Room Airflow*”, **ASHRAE Transactions**, 104, pp. 1119-1127, 1998.

NIELSEN, P. V., OLMEDO, I., DE ADANA, M. R., GRZELECKI, P., JENSEN, R. L. 2012, “*Airborne Cross-Infection Risk Between Two People Standing in Surroundings With a Vertical Temperature Gradient*”, **HVAC&R Research**, Vol.18 (4), pp. 552-561, 2012.

NSF / ANSI, 2009, **Biosafety Cabinetry: Design, Construction, Performance, and Field Certification**. Standard nº49

OLANDER, L., WELLING, I., FLETCHER, B., 2001. “*Local Ventilation: Evaluation of Local Ventilation Systems*”. In: Goodfellow, H., Tähti, E., (Ed.), *Industrial Ventilation Design Guidebook*, chapter 14, San Diego, Academic Press.

OSHA - OCCUPATIONAL SAFETY AND HEALTH ADMINISTRATION, 2012, **Occupational exposure to hazard chemicals in laboratories**. Standard nº1910.1450.

PANTELIC, J., THAM, K. W. 2012, “Assessment of the Mixing Air Delivery System Ability to Protect Occupants from the Airborne Infectious Disease Transmission Using Wells-Riley Approach”, *HVAC&R Research*, Vol.18 (4), pp. 562-574, 2012.

PANTELIC, J., THAM, K. W. 2013, “Adequacy of Air Change Rate As The Sole Indicator of An Air Distribution System’s Effectiveness to Mitigate Airborne Infectious Disease Transmission Caused by a Cough Release in the Room With Overhead mixing Ventilation: A Case Study”, *HVAC&R Research*, Vol.19, pp. 947-961, 2013.

PATANKAR, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, New York, Hemisphere Publishing Corporation, Taylor & Francis group.

PATANKAR, S. V., SPALDING, D. B. 1972, “A Calculation Procedure for Heat, Mass, and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.15, pp. 1787, 1972.

PIKE, R. M. 1979, “Laboratory-Associated Infections: Incidence, Fatalities, Causes, and Prevention”, *Annual Review of Microbiology*, Vol.33, pp. 41-66, 1979.

POPE, S. B., 2000, *Turbulent Flows*, Cambridge University Press.

RAPPARINI, C., CARDO, D. M., 2005. “Principais Doenças Infecciosas Diagnosticadas em Profissionais de Saúde”. In: Mastroeni, M., F., (Ed.), Biossegurança Aplicada a Laboratórios e Serviços de Saúde, capítulo 12, 2ª edição, São Paulo, Editora Atheneu.

REINMUTH, F., 1999, *Climatisation & Conditionnement d’air modernes par l’exemple*, Paris, Éditions PYC Livres.

RICHMOND, J. Y., HOWARD, W., 1997. “Bio-Risk Assessment in Laboratory Design”. In: Richmond, J., Y., (Ed.), *Designing Modern Microbiological / Biomedical Labs*, chapter 4, Washington, American Public Health Association.

RILEY, R. L., WELLS, W. F., CRETYL, C. M., NYKA, W., McLEAN, R. L. 1957, “Air Hygiene in Tuberculosis: Quantitative Studies of Infectivity and Control in a Pilot Ward”, *American Review of Tuberculosis*, Vol.75 (3), pp. 420-431, 1957.

RILEY, R.L., O’GRADY, F., 1961, *Airborne Infection*, 1st ed., New York, The Macmillian Company.

ROACHE, P.J.. 1994, “Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies”, *ASME Journal of Fluids Engineering*, Vol.116 (3), pp. 405-413, 1994.

ROUAUD, O., HAVET, M. 2002, “Computation of the Airflow in a Pilot Scale Clean Room Using k - ϵ Turbulence Models”, *International Journal of Refrigeration*, Vol.25 (3), pp. 351-361, 2002.

ROY, C. J., MILTON, D. K. 2004, “Airborne Transmission of Communicable Infection – The Elusive Pathway”, *New England Journal of Medicine*, Vol.350 (17), pp. 1710-1712, 2004.

SCHLICHTING, H., 1979, *Boundary Layer Theory*, 7th ed., New York, McGraw-Hill.

- SEWELL, D. L. 2006, "Laboratory Acquired Infections: Are Microbiologists at Risk?", **Clinical Microbiology Newsletter**, Vol.28 (1), Janeiro 2006.
- SINGH, K. 2009, "Laboratory-Acquired Infections", **Clinical Infectious Diseases**, Vol.49, pp. 142-147, 2009.
- SREBRIC, J., CHEN, Q., 2001, "A method of Test to Obtain Diffuser Data for CFD Modeling of Room Airflow.", **ASHRAE Transactions**, 107 (2), pp. 108-116.
- SREBRIC, J., CHEN, Q., GLICKSMAN, L.R., 1999, "Validation of a Zero-Equation Turbulence Model for Complex Indoor Airflows.", **ASHRAE Transactions**, 105 (2), pp. 414-427.
- TIAN, L., AHMADI, G., HOPKE, P.K., CHENG, Y.S., 2010, "CFD study of Human Respiratory Dose to Indoor Particular Contaminants.", **ASHRAE Transactions**, 116.
- THOMAS, L. H. 1949, "Elliptic Problems in Linear Differential Equations Over a Network", **Watson Sci. Computer Laboratory Report**, Columbia University, New York.
- THRELKELD, J.W., KUEHN, T.H., RAMSEY, J.W., 1998, **Thermal Environmental Engineering**, 3rd ed., New York, McGraw-Hill.
- VERSTEEG, H. K., MALALASEKERA, W., 2007, **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**, 2nd ed., Glasgow, Pearson Education Limited.
- YAN, W., MARR, L.C., 2011 Dynamics of Airborne Influenza A Viruses Indoors and Dependence on Humidity. PLoS ONE 6(6): e21481. Disponível em: <http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0021481> , acesso em 09 Mar. 2015.
- YAKHOT, V., ORSZAG, S.A. 1986, "Renormalization Group Analysis of Turbulence", **Journal of Scientific Computing**, Vol.1, pp. 3-51, 1986.
- WALTON, G. N., DOLS, W. S., 2013. **CONTAM User Guide and Program Documentation**. Gaithersburg, MD, National Institute of Standard and Technology.
- WANG, L., 2007, *Coupling of Multizone and CFD programs for Building Airflow and Contaminant Transport Simulations*. Tese de P.hD., Purdue University, West Lafayette, IN, Estados Unidos.
- WANG, L., CHEN, Q. 2007a, "Theoretical and Numerical Studies of Coupling Multizone and CFD models for Building Air Distribution Simulations", **Indoor Air**, Vol.17 (5), pp. 348-361, 2007.
- WANG, L., CHEN, Q. 2007b, "Validation of a Coupled Multizone-CFD Program for Building Airflow and Contaminant Transport Simulation", **HVAC&R Research**, Vol.13 (2), pp. 267-281, 2007.
- WANG, L., CHEN, Q. 2008, "Applications of a Coupled Multizone-CFD Model to Calculate Airflow and Contaminant Dispersion in Built Environments for Emergency Management", **HVAC&R Research**, Vol.14 (6), pp. 925-939, 2008.

- WANG, M., CHEN, Q. 2009, "Assessment of Various Turbulence Models for Transitional Flows in an Enclosed Environment (RP-1271)", *HVAC&R Research*, Vol.15 (6), pp. 1099-1119, 2009.
- WANG, M., LIN, C.H., CHEN, Q. 2012, "Advanced Turbulence Models for Predicting Particle Transport in Enclosed Environments", *Building & Environment*, Vol.47, pp. 40-49, 2012.
- WANG, H., ZHAI, Z., LI, Y., LIU, X. 2012, "Identifying Index (source) Patient Location of SARS Transmission in a Hospital Ward", *HVAC&R Research*, Vol.18 (4), pp. 616-625, 2012.
- WEALE, J., SARTOR, D., LOCK, L.E., 2005. Low-Pressure-Drop HVAC Design for Laboratories. Disponível em: http://www.epa.gov/lab21gov/pdf/bp_lowpressure_508.pdf , Acesso em 16 Fev. 2011.
- WEDUM, A. G. 1964, "Laboratory Safety in Research with Infectious Aerosols", *Public Health Report*, Vol.79 (7), pp.619-633, 1964.
- WELLS, W.F. 1934, "On Airborne Infection, Study II. Droplets & Droplet Nuclei", *American Journal of Hygiene*, Vol.20, pp. 611-618,1934.
- WELLS, W.F., WELLS, M.W., WILDER, T.S. 1942, "The Environmental Control of Epidemic Contagion I. An Epidemiologic Study of Radiant Desinfection of Air in Day Schools", *American Journal of Hygiene*, Vol.35, pp. 97-121,1934.
- WHO, 2004. **Laboratory Biosafety Manual**. Geneva, 3rd ed., WORLD HEALTH ORGANIZATION.
- WHO, 2009. **WHO Guidelines for Indoor Air Quality: Dampness and Mould**. Copenhagen, 3rd ed., WORLD HEALTH ORGANIZATION Regional Office for Europe.
- WILCOX, D.C. 1988, "Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models", *AIHAA journal*, Vol.26, pp. 1299-1310, 1988.
- WIRDZEK, P., LINTNER, W., VAN GEET, O., REILLY, S., 2003. Energy Recovery for Ventilation Air in Laboratories. Disponível em: http://www.epa.gov/lab21gov/pdf/bp_recovery_508.pdf , Acesso em 18 Fev. 2011.
- XIAOPING, L., JIANLEI, N., NAIPING, G. 2011, "Spatial Distribution of Human Respiratory Droplet Residuals and Exposure Risk fot the Co-occupant Under Diferent Ventilation Methods", *HVAC&R Research*, Vol.17 (4), pp. 432-445, 2011.
- XIE, X., LI, Y., CHWANG, A. T., HO, P. L., SETO, W. H. 2007, "How Far Droplets Can Move in Indoor Environments- Revisiting The Wells Evaporation-Falling Curve", *Indoor Air*, Vol.17(3), pp. 211-225, 2007.
- YAN, W., MARR, L.C., 2011 Dynamics of Airborne Influenza A Viruses Indoors and Dependence on Humidity. PLoS ONE 6(6): e21481. Disponível em: <http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0021481> , acesso em 09 Mar. 2015.

YIN, Y., XU, W., GUPTA, J. K., GUILTY, A., MARMION, P., MANNING, A., GULICK, B., ZHANG, X., CHEN, Q. 2009, “*Experimental Study on Displacement and Mixing Ventilation Systems for a Patient Ward*”, **HVAC&R Research**, Vol.15, n°.6, pp. 1175-1191, Novembro 2009.

YUGUO, L., TANG, J., NOAKES, C., HODGSON, M.J. 2015, “*Engineering Control of Respiratory Infection and Low-Energy Design of Healthcare Facilities*”, **Science and Technology for the Built Environment**, Vol.21, pp. 25-34, 2015.

ZHAI, Z. J., ZHANG, Z., ZHANG, W., CHEN, Q. 2007, “*Evaluation of Various Turbulence Models in Predicting Airflow and Turbulence in Enclosed Environments by CFD: Part 1 – Summary of Prevalent Turbulence Models*”, **HVAC&R Research**, Vol.13 (6), pp. 853-870, 2007.

ZHAO, B., WU, J. 2007, “*Particle Deposition in Indoor Environments: Analysis of Influencing Factors*”, **Journal of Hazardous Materials**, Vol.147, pp. 439-448, Janeiro 2007.

ZHAO, X., ZHANG, X., XU, X., XU, J., WENG, W., PU, W., 2009, “*Seasonal and Diurnal Variations of Ambient PM 2.5 Concentration in Urban & Rural environments in Beijing*”, **Atmospheric Environment**, Vol.43, pp. 2893-2900.

ZHANG, Z., ZHANG, W., ZHAI, Z. J., CHEN, Q. 2007, “*Evaluation of Various Turbulence Models in Predicting Airflow and Turbulence in Enclosed Environments by CFD: Part 1 – Comparison with Experimental Data from Literature*”, **HVAC&R Research**, Vol.13 (6), pp. 871-886, 2007.

ANEXO A

Este anexo tem o objetivo de apresentar as especificações das condições de contorno adotadas para validação da simulação pelo *benchmark* da ASHRAE (2009). Este modelo possui as seguintes superfícies de contorno, conforme figura a seguir:

- Entrada de ar;
- Saída de ar;
- Obstáculo;
- Paredes;

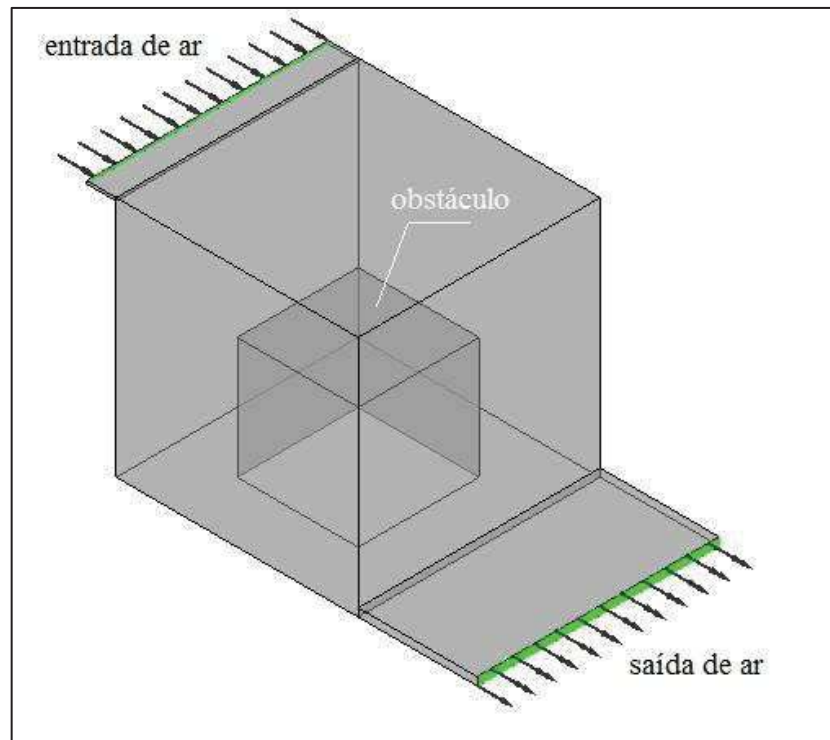


Figura A.1 Configuração geral das superfícies de contorno do modelo do benchmark da ASHRAE.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela A.1- Especificação das condições de contorno da entrada de ar – benchmark da ASHRAE

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)		
Área da seção transversal		$3,66 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$3,66 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica		
	Valor especificado	$0,12 kg.s^{-1}$		
	Direção do fluxo	Normal à entrada		
Turbulência	Especificação	intensidade turbulenta	Interno ao código	intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%		10%
Energia	Especificação	temperatura		
	Valor especificado	22,2 °C		

Estes valores foram retirados das medições realizadas pela ASHRAE (2009). A intensidade turbulenta foi medida pela ASHRAE, e percebe-se que o valor é associado à alta intensidade turbulenta (10%). A especificação das condições de contorno associadas à saída de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela A.2- Especificação das condições de contorno da saída de ar – benchmark da ASHRAE

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$9,76 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$9,76 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Pressão relativa	Vazão mássica	Pressão relativa
	Valor especificado	0,0 Pa	$0,12 kg.s^{-1}$	0,0 Pa

No caso do CONTAM/CFD-0, as condições de contorno de vazão são impostas pelo acoplamento do módulo CONTAM com o CFD-0 através de uma relação tipo “power-law”, conforme equação 5.9.

As condições de contorno de dissipação de calor das paredes não-adiabáticas se aplicam apenas às superfícies do obstáculo, e esta informação está especificada na tabela a seguir:

Tabela A.3- Especificação da dissipação de calor das paredes – benchmark da ASHRAE

superfície	Dissipação de calor total (W)
obstáculo	700

ANEXO B

Este anexo tem o objetivo de apresentar as especificações das condições de contorno adotadas para validação da simulação pelo *benchmark* de laboratório de JIN *et al* (2012). Este modelo possui as seguintes superfícies de contorno, conforme a figura a seguir:

- Entrada de ar;
- Entrada de contaminante;
- Saída de ar;
- Equipamentos e pessoas;
- Paredes;

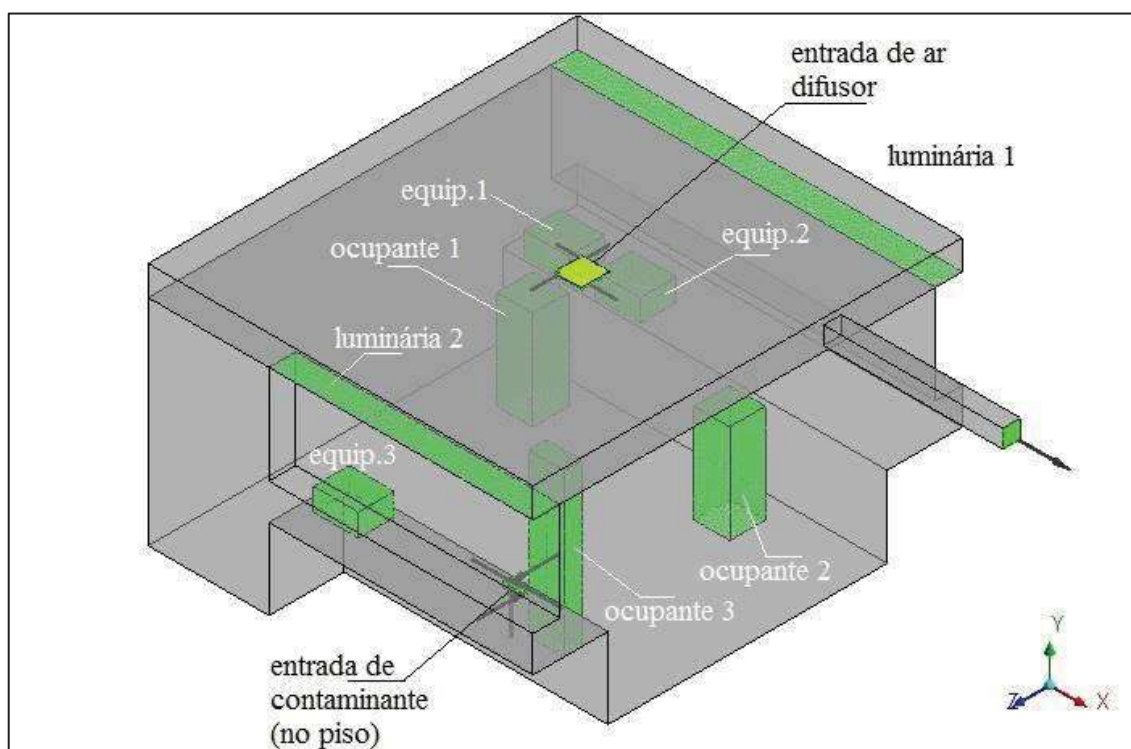


Figura B.1 Configuração geral das superfícies de contorno do modelo do benchmark de laboratório.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela B.1- Especificação das condições de contorno da entrada de ar – benchmark de laboratório

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)		
Área da seção transversal		$9,00 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$3,62 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica		
	Valor especificado	$0,225 kg.s^{-1}$		
	Direção do fluxo	Em função do método de modelagem		
	Método de modelagem do difusor	<i>Momentum method</i>	<i>Basic model</i>	<i>Momentum method</i>
Turbulência	Especificação	intensidade turbulenta	Interno ao código	intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%		10%
Energia	Especificação	temperatura		
	Valor especificado	15,6 °C		
Contaminante	Especificação	Fração mássica		
	Valor especificado	0,0		

A entrada de contaminante foi modelada de modo a similar ao do trabalho de JIN *et al* (2012), com a injeção do mesmo diluído em baixa concentração e velocidade. A especificação das condições de contorno associadas está resumida na tabela a seguir.

Tabela B.2- Especificação das condições de contorno da entrada de contaminante – benchmark de laboratório

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)		
Área da seção transversal		$5,00 \times 10^{-2} m^2$		

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Área efetiva		$5,00 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica		
	Valor especificado	$2,06 \times 10^{-5} kg.s^{-1}$		
	Direção do fluxo	Normal à entrada		
Turbulência	Especificação	intensidade turbulenta	Interno ao código	intensidade turbulenta
	Valor especificado	3%		3%
Energia	Especificação	temperatura		
	Valor especificado	20,0 °C		
Contaminante	Especificação	Fração mássica		
	Valor especificado	0,01		

A especificação das condições de contorno associadas à saída de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela B.3- Especificação das condições de contorno da saída de ar – benchmark de laboratório

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$9,00 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$9,00 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Pressão relativa	Vazão mássica	Pressão relativa
	Valor especificado	0,0 Pa	$0,225 kg.s^{-1}$	0,0 Pa

A dissipação de calor das superfícies associadas está especificada na tabela a seguir:

Tabela B.4- Especificação da dissipação de calor das paredes – benchmark de Laboratório

superfície	Dissipação de calor total (W)
Ocupante 1	100
Ocupante 2	87
Ocupante 3	87
Equipamento 1	84
Equipamento 2	84
Equipamento 3	84
Luminária 1	60
Luminária 2	60

ANEXO C

Este anexo tem o objetivo de apresentar as especificações das condições de contorno adotadas para validação da simulação pelo *benchmark* hospitalar de YIN *et al* (2009). Este modelo possui as seguintes superfícies de contorno, demonstradas na figura C.1:

- Entrada de ar;
- Entrada de contaminante;
- Saídas de ar – exaustão geral e do WC;
- Equipamentos e pessoas – paredes não-adiabáticas;
- Paredes adiabáticas;

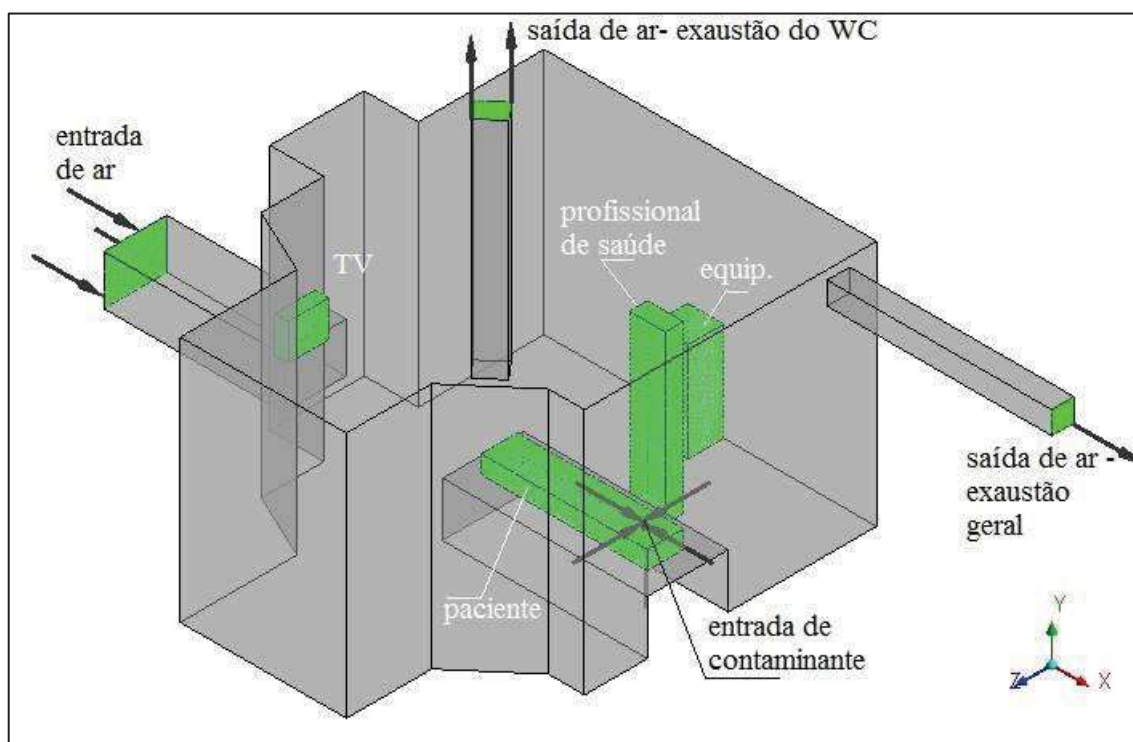


Figura C.1 Configuração geral das superfícies de contorno do modelo do benchmark hospitalar.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela C.1- Especificação das condições de contorno da entrada de ar – benchmark hospitalar

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)		
Área da seção transversal		0,385 m^2		
Área efetiva		0,317 m^2		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica		
	Valor especificado	0,0646 $kg.s^{-1}$		
	Direção do fluxo	Em função do método de modelagem		
	Método de modelagem do difusor	<i>Momentum method</i>	<i>Basic model</i>	<i>Momentum method</i>
Turbulência	Especificação	intensidade turbulenta	Interno ao código	intensidade turbulenta
	Valor especificado	5%		5%
Energia	Especificação	temperatura		
	Valor especificado	19,5 °C		
Contaminante	Especificação	Fração mássica		
	Valor especificado	0,0		

O trabalho de YIN *et al* (2009) não apresenta informações sobre a intensidade turbulenta no difusor de insuflação de ar. Dado que se trata de um sistema de ventilação por deslocamento positivo (DV), com ar insuflado diretamente na zona de ocupação, foi adotado o valor recomendado pelo guia do usuário da ANSYS (2012c) de média intensidade de turbulência (5%).

A entrada de contaminante foi modelada de modo a similar ao do trabalho de YIN *et al* (2009), com a injeção do mesmo diluído em baixa concentração e velocidade. A especificação das condições de contorno associadas está resumida na tabela a seguir.

Tabela C.2- Especificação das condições de contorno da entrada de contaminante – benchmark hospitalar

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)		
Área da seção transversal		$1,25 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$1,25 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica		
	Valor especificado	$3,09 \times 10^{-5} kg.s^{-1}$		
	Direção do fluxo	Normal à entrada		
Turbulência	Especificação	intensidade turbulenta	Interno ao código	intensidade turbulenta
	Valor especificado	5%		5%
Energia	Especificação	temperatura		
	Valor especificado	37,0 °C		
Contaminante	Especificação	Fração mássica		
	Valor especificado	0,01		

A especificação das condições de contorno associadas à saída de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela C.3-Especificação das condições de contorno da saída de ar da exaustão do banheiro – benchmark hospitalar

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$7,50 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$7,50 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica	Vazão mássica	Vazão mássica
	Valor especificado	0,044 $kg.s^{-1}$	0,044 $kg.s^{-1}$	0,044 $kg.s^{-1}$

Tabela C.4- Especificação das condições de contorno da saída de ar da exaustão geral – benchmark hospitalar

		CFX	CONTAM/ CFD-0	FLUENT
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$6,25 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$6,25 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Pressão relativa	Vazão mássica	Pressão relativa
	Valor especificado	0,0 Pa	0,020 $kg.s^{-1}$	0,0 Pa

A dissipação de calor das superfícies associadas está especificada na tabela a seguir:

Tabela C.5- Especificação da dissipação de calor das paredes – benchmark hospitalar

superfície	Dissipação de calor total (W)
Paciente	106
Profissional de saúde	110
Equipamento	36
TV	24

ANEXO D

Este anexo tem o objetivo de apresentar as especificações das condições de contorno adotadas para validação da simulação do desempenho operacional da cabine de segurança biológica (BSC). Este modelo possui as seguintes superfícies de contorno, conforme figura a seguir:

- Entrada de ar (*downflow*);
- Saídas de ar (frestas de exaustão);
- Aberturas;
- Paredes;

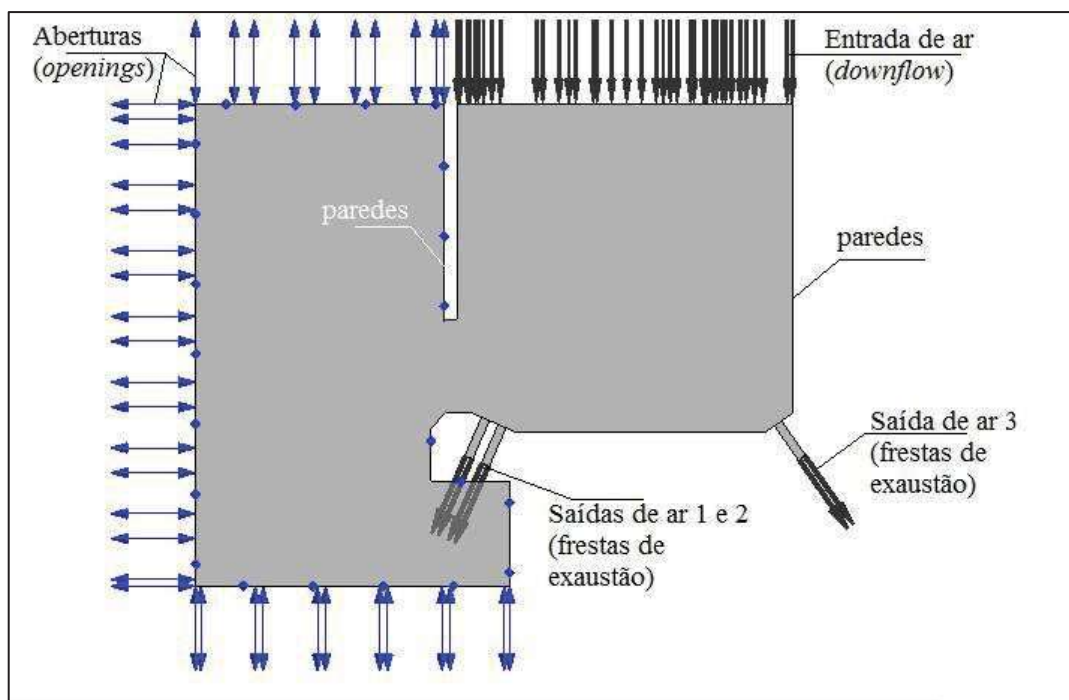


Figura D.1 Configuração geral das superfícies de contorno do modelo da BSC.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar está resumida na tabela a seguir.

Tabela D.1- Especificação das condições de contorno da entrada de ar – validação numérica BSC

Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)
Área da seção transversal		$7,43 \times 10^{-1} m^2$
Área efetiva		$7,43 \times 10^{-1} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica
	Valor especificado	$0,3321 kg.s^{-1}$
	Direção do fluxo	Normal à entrada
Turbulência	Especificação	Intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%
Energia	Especificação	temperatura
	Valor especificado	22 °C

A especificação das condições de contorno associadas às saídas de ar estão resumidas na tabela a seguir.

Tabela D.2- Especificação das condições de contorno da saída de ar –validação numérica BSC

		Saída 1	Saída 2	Saída 3
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$1,85 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$1,85 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica	Vazão mássica	Vazão mássica
	Valor especificado	$0,1652 kg.s^{-1}$	$0,1652 kg.s^{-1}$	$0,1416 kg.s^{-1}$

As aberturas foram modeladas com pressão manométrica igual a 0 Pa.

ANEXO E

Este anexo tem o objetivo de apresentar as especificações das condições de contorno adotadas para simulação do caso *baseline*. Este modelo possui as seguintes superfícies de contorno, demonstradas na figura E.1:

- Entrada de ar de insuflação;
- Entrada de ar de infiltração;
- Entrada de ar de downflow da BSC (entrada de contaminante);
- Entrada de ar de descarga da BSC;
- Saídas de ar 1,2,3 – frestas de exaustão da BSC;
- Saída de ar de exaustão geral;
- Equipamentos– superfícies com dissipação de calor;
- Paredes adiabáticas;

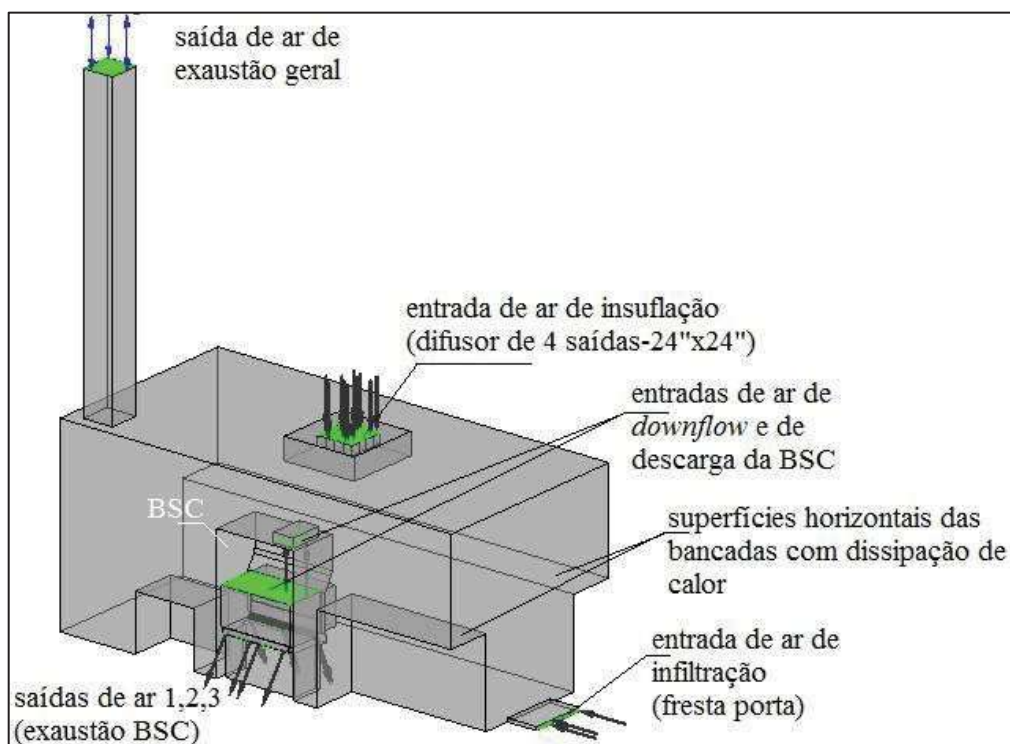
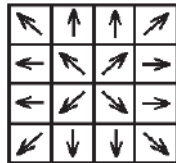


Figura E.1 Configuração geral das superfícies de contorno do modelo *baseline* do laboratório.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar de insuflação está resumida na tabela a seguir.

Tabela E.1- Especificação das condições de contorno da entrada de ar de insuflação – *baseline*

Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)
Área da seção transversal		$3,60 \times 10^{-1} m^2$
Área efetiva		$1,51 \times 10^{-1} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica
	Valor especificado	$3,876 \times 10^{-1} kg.s^{-1}$
	Direção do fluxo	 <p>Vista superior - Conforme SREBRIC <i>et</i> CHEN (2002) para <i>momentum method</i></p>
	Método de modelagem do difusor	<i>Momentum method</i>
Turbulência	Especificação	Intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%
Energia	Especificação	temperatura
	Valor especificado	17,0 °C
Contaminante	Especificação	Fração mássica
	Valor especificado	0,0

Foi adotada intensidade turbulenta de insuflação de 10% em função deste valor ter sido medido pela ASHRAE (2009) em seu benchmark, com sistema de ventilação por mistura.

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar de infiltração está resumida na tabela a seguir.

Tabela E.2- Especificação das condições de contorno da entrada de ar de infiltração – *baseline*

Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)
Área da seção transversal		$2,25 \times 10^{-2} m^2$
Área efetiva		$2,25 \times 10^{-2} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica
	Valor especificado	$5,60 \times 10^{-2} kg.s^{-1}$
	Direção do fluxo	Normal à entrada
Turbulência	Especificação	Intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%
Energia	Especificação	temperatura
	Valor especificado	22,0 °C
Contaminante	Especificação	Fração mássica
	Valor especificado	0,0

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar de descarga da BSC está resumida na tabela a seguir.

Tabela E.3- Especificação das condições de contorno da entrada de ar de descarga BSC – *baseline*

Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)
Área da seção transversal		$1,87 \times 10^{-1} m^2$
Área efetiva		$1,87 \times 10^{-1} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica
	Valor especificado	$1,399 \times 10^{-1} kg.s^{-1}$
	Direção do fluxo	Normal à entrada
Turbulência	Especificação	Intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%
Energia	Especificação	temperatura
	Valor especificado	22,0 °C

Contaminante	Especificação	Fração mássica
	Valor especificado	0,0

A especificação das condições de contorno associadas à entrada de ar de downflow da BSC (entrada de contaminante) está resumida na tabela a seguir.

Tabela E.4- Especificação das condições de contorno da entrada de ar de *downflow* BSC – *baseline*

Tipo de contorno		Entrada (<i>inlet</i>)
Área da seção transversal		$7,43 \times 10^{-1} m^2$
Área efetiva		$7,43 \times 10^{-1} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica
	Valor especificado	$3,321 \times 10^{-1} kg.s^{-1}$
	Direção do fluxo	Normal à entrada
Turbulência	Especificação	Intensidade turbulenta
	Valor especificado	10%
Energia	Especificação	temperatura
	Valor especificado	22,0 °C
Contaminante	Especificação	Fração mássica
	Valor especificado	0,01

A especificação das condições de contorno associadas às saídas de ar de exaustão da BSC (saídas 1,2,3) estão resumidas na tabela a seguir.

Tabela E.5- Especificação das condições de contorno da saída de ar exaustão BSC - baseline

		Saída 1	Saída 2	Saída 3
Tipo de contorno		Saída (<i>outlet</i>)		
Área da seção transversal		$1,85 \times 10^{-2} m^2$		
Área efetiva		$1,85 \times 10^{-2} m^2$		
Quantidade de movimento	Especificação	Vazão mássica	Vazão mássica	Vazão mássica
	Valor especificado	0,1652 $kg.s^{-1}$	0,1652 $kg.s^{-1}$	0,1416 $kg.s^{-1}$

A especificação das condições de contorno associadas à saída de ar de exaustão geral do laboratório está resumida na tabela a seguir.

Tabela E.6- Especificação das condições de contorno da saída de ar exaustão geral - baseline

		Saída de exaustão geral do lab.
Tipo de contorno		Abertura (<i>opening</i>)
Área da seção transversal		$2,50 \times 10^{-1} m^2$
Área efetiva		$2,50 \times 10^{-1} m^2$
Quantidade de movimento	Especificação	Pressão relativa
	Valor especificado	0 Pa

A dissipação de calor das superfícies associadas está especificada na tabela a seguir:

Tabela E.7- Especificação da dissipação de calor das superfícies equipamentos – baseline

superfície	Dissipação de calor total (W)
Superfície horizontal – bancada maior – 6,60 m x 0,75m	1.374
Superfície horizontal – bancada menor – 2,40 m x 0,75m	500

ANEXO F

Tabela F.1- Resultados da Validação dos Códigos pelo benchmark-ASHRAE RP 1271-Caso 2 – plano longitudinal ($y = 1,22$ m)

$x = 0,22$ m							
	Velocidade adimensional			TKE adimensional		Viscos. Turb. [Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,03	0,08	0,07	0,08	0,045	0,027	3,97E-04	5,34E-04
0,09	0,07	0,07	0,07	0,061	0,040	1,19E-03	9,68E-04
0,16	0,07	0,08	0,07	0,057	0,050	1,28E-03	1,18E-03
0,22	0,07	0,08	0,07	0,064	0,053	1,31E-03	1,32E-03
0,28	0,09	0,08	0,07	0,066	0,056	1,34E-03	1,45E-03
0,34	0,09	0,08	0,07	0,070	0,059	1,37E-03	1,55E-03
0,41	0,09	0,09	0,07	0,058	0,062	1,41E-03	1,62E-03
0,47	0,08	0,09	0,07	0,059	0,062	1,43E-03	1,67E-03
0,53	0,09	0,09	0,06	0,059	0,059	1,43E-03	1,59E-03
0,59	0,08	0,09	0,07	0,052	0,054	1,43E-03	1,49E-03
0,66	0,08	0,09	0,08	0,048	0,047	1,39E-03	1,17E-03
0,72	0,07	0,08	0,09	0,051	0,040	1,33E-03	8,50E-04
0,78	0,06	0,08	0,08	0,049	0,032	1,25E-03	7,78E-04
0,84	0,06	0,07	0,05	0,038	0,028	1,14E-03	9,80E-04
0,91	0,05	0,06	0,04	0,032	0,025	9,22E-04	1,34E-03
0,97	0,05	0,09	0,09	0,038	0,471	5,42E-04	9,61E-04
$x = 0,69$ m							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,03	0,01	0,02	0,026	0,038	3,91E-04	5,25E-04
0,59	0,08	0,05	0,09	0,048	0,056	2,21E-03	1,05E-03
0,66	0,07	0,06	0,09	0,046	0,044	2,71E-03	1,27E-03
0,72	0,07	0,06	0,08	0,048	0,039	2,80E-03	1,33E-03
0,78	0,07	0,06	0,05	0,054	0,041	2,18E-03	1,64E-03
0,84	0,07	0,06	0,03	0,042	0,033	1,58E-03	1,79E-03
0,91	0,06	0,06	0,03	0,034	0,034	1,03E-03	9,24E-04
0,97	0,27	0,33	0,30	0,572	0,761	1,79E-03	1,93E-03
$x = 1,14$ m							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,02	0,01	0,01	0,017	0,016	7,05E-04	1,14E-03
0,59	0,03	0,02	0,02	0,025	0,024	1,38E-03	1,92E-03
0,66	0,03	0,03	0,03	0,024	0,032	1,50E-03	1,81E-03
0,72	0,05	0,03	0,03	0,041	0,037	1,45E-03	1,65E-03
0,78	0,06	0,04	0,04	0,046	0,032	1,32E-03	1,85E-03
0,84	0,06	0,04	0,04	0,043	0,026	1,13E-03	1,69E-03
0,91	0,07	0,07	0,06	0,043	0,103	1,11E-03	1,26E-03

0,97	0,31	0,36	0,35	0,561	0,554	1,95E-03	2,14E-03
$x = 1,60 \text{ m}$							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,04	0,01	0,02	0,056	0,021	4,71E-04	1,14E-03
0,59	0,03	0,05	0,02	0,022	0,039	2,83E-03	1,62E-03
0,66	0,03	0,05	0,02	0,019	0,049	2,79E-03	1,98E-03
0,72	0,03	0,04	0,01	0,020	0,042	2,08E-03	2,23E-03
0,78	0,04	0,05	0,01	0,022	0,029	1,86E-03	2,01E-03
0,84	0,05	0,06	0,03	0,027	0,036	1,54E-03	1,16E-03
0,91	0,07	0,11	0,13	0,065	0,210	1,80E-03	2,43E-03
0,97	0,31	0,35	0,36	0,425	0,367	1,88E-03	2,04E-03
$x = 2,05 \text{ m}$							
	Velocidade adimensional			TKE adimensional		Viscos. Turb. [Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,03	0,12	0,09	0,13	0,125	0,208	5,00E-04	2,83E-03
0,09	0,11	0,05	0,05	0,177	0,225	8,20E-04	4,31E-03
0,16	0,10	0,05	0,03	0,172	0,277	1,36E-03	4,95E-03
0,22	0,11	0,05	0,03	0,215	0,308	1,37E-03	4,57E-03
0,28	0,10	0,06	0,03	0,152	0,312	1,60E-03	4,34E-03
0,34	0,10	0,07	0,02	0,186	0,300	1,90E-03	4,07E-03
0,41	0,10	0,08	0,01	0,187	0,276	2,07E-03	3,75E-03
0,47	0,10	0,08	0,01	0,227	0,245	2,14E-03	3,36E-03
0,53	0,10	0,08	0,02	0,214	0,201	2,25E-03	2,86E-03
0,59	0,09	0,09	0,04	0,242	0,145	2,29E-03	2,36E-03
0,66	0,07	0,08	0,06	0,126	0,103	2,22E-03	2,02E-03
0,72	0,05	0,08	0,07	0,082	0,083	2,14E-03	1,97E-03
0,78	0,05	0,08	0,07	0,058	0,086	2,19E-03	2,27E-03
0,84	0,07	0,11	0,10	0,099	0,128	2,94E-03	2,46E-03
0,91	0,16	0,19	0,17	0,281	0,220	3,11E-03	2,65E-03
0,97	0,31	0,27	0,31	0,364	0,214	1,44E-03	1,63E-03

Tabela F.2- Resultados da Validação dos Códigos pelo benchmark-ASHRAE RP 1271-Caso 2 – plano transversal ($x = 1,22$ m)

$y = 0,22$ m							
	Velocidade adimensional			TKE adimensional		Viscos. Turb. [Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,03	0,16	0,16	0,19	0,119	0,079	8,83E-04	1,59E-03
0,09	0,13	0,14	0,11	0,134	0,078	2,17E-03	2,12E-03
0,16	0,08	0,12	0,06	0,096	0,066	1,95E-03	2,72E-03
0,22	0,07	0,11	0,04	0,088	0,063	1,73E-03	2,89E-03
0,28	0,07	0,10	0,03	0,072	0,060	1,54E-03	2,75E-03
0,34	0,05	0,08	0,02	0,048	0,055	1,36E-03	2,38E-03
0,41	0,04	0,07	0,02	0,031	0,050	1,17E-03	2,03E-03
0,47	0,03	0,06	0,02	0,018	0,044	9,56E-04	1,80E-03
0,53	0,03	0,05	0,03	0,020	0,038	7,81E-04	1,62E-03
0,59	0,03	0,03	0,03	0,016	0,033	5,59E-04	1,47E-03
0,66	0,02	0,03	0,03	0,008	0,030	4,49E-04	1,35E-03
0,72	0,02	0,03	0,03	0,012	0,027	4,63E-04	1,29E-03
0,78	0,03	0,03	0,03	0,011	0,024	5,44E-04	1,22E-03
0,84	0,03	0,04	0,03	0,018	0,021	6,47E-04	1,08E-03
0,91	0,04	0,06	0,05	0,019	0,031	9,45E-04	7,09E-04
0,97	0,30	0,35	0,33	0,670	0,052	1,93E-03	2,03E-03
$y = 0,69$ m							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,03	0,01	0,01	0,013	0,021	5,84E-04	7,37E-03
0,59	0,03	0,01	0,03	0,033	0,033	7,04E-04	9,99E-04
0,66	0,03	0,02	0,03	0,024	0,036	9,23E-04	1,59E-03
0,72	0,03	0,03	0,03	0,019	0,031	1,22E-03	1,86E-03
0,78	0,04	0,03	0,03	0,030	0,028	1,18E-03	1,94E-03
0,84	0,04	0,04	0,03	0,034	0,029	1,05E-03	1,56E-03
0,91	0,05	0,09	0,07	0,052	0,142	1,43E-03	1,54E-03
0,97	0,32	0,37	0,36	0,475	0,509	2,03E-03	2,09E-03
$y = 1,14$ m							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,03	0,01	0,01	0,017	0,017	9,39E-04	1,22E-03
0,59	0,02	0,02	0,02	0,012	0,022	1,35E-03	1,98E-03
0,66	0,03	0,02	0,02	0,027	0,026	1,25E-03	2,07E-03
0,72	0,04	0,03	0,02	0,035	0,027	1,23E-03	2,04E-03
0,78	0,06	0,03	0,02	0,039	0,024	1,22E-03	1,94E-03
0,84	0,06	0,04	0,03	0,037	0,023	1,06E-03	1,45E-03
0,91	0,07	0,07	0,07	0,041	0,126	1,21E-03	1,46E-03

0,97	0,27	0,36	0,35	0,488	0,524	1,97E-03	2,15E-03
y = 1,60 m							
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,53	0,03	0,02	0,02	0,017	0,013	9,97E-04	9,12E-04
0,59	0,03	0,02	0,01	0,019	0,018	1,39E-03	1,53E-03
0,66	0,03	0,03	0,02	0,026	0,023	1,49E-03	1,63E-03
0,72	0,04	0,03	0,04	0,030	0,029	1,43E-03	1,55E-03
0,78	0,06	0,04	0,06	0,036	0,027	1,31E-03	1,47E-03
0,84	0,06	0,04	0,05	0,038	0,029	1,09E-03	1,46E-03
0,91	0,07	0,09	0,10	0,039	0,150	1,47E-03	1,60E-03
0,97	0,30	0,38	0,38	0,497	0,465	2,05E-03	1,95E-03
y = 2,05 m							
	Velocidade adimensional			TKE adimensional		Viscos. Turb. [Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX	Exp.	CFX	Contam	CFX
0,03	0,08	0,17	0,20	0,130	0,083	9,13E-04	1,65E-03
0,09	0,10	0,14	0,15	0,097	0,104	2,26E-03	2,88E-03
0,16	0,09	0,11	0,13	0,078	0,136	2,94E-03	2,87E-03
0,22	0,08	0,09	0,10	0,078	0,140	2,49E-03	2,87E-03
0,28	0,06	0,08	0,07	0,075	0,117	2,19E-03	2,95E-03
0,34	0,05	0,07	0,05	0,058	0,081	1,95E-03	2,96E-03
0,41	0,04	0,06	0,03	0,034	0,046	1,72E-03	2,15E-03
0,47	0,04	0,05	0,02	0,023	0,023	1,46E-03	1,53E-03
0,53	0,04	0,05	0,01	0,025	0,020	1,31E-03	1,70E-03
0,59	0,03	0,04	0,01	0,016	0,024	1,09E-03	1,84E-03
0,66	0,02	0,04	0,01	0,011	0,027	9,67E-04	1,78E-03
0,72	0,02	0,03	0,03	0,010	0,029	9,50E-04	1,72E-03
0,78	0,03	0,04	0,04	0,014	0,029	1,03E-03	1,73E-03
0,84	0,05	0,04	0,03	0,021	0,032	1,14E-03	1,44E-03
0,91	0,05	0,07	0,03	0,027	0,088	1,18E-03	1,14E-03
0,97	0,33	0,37	0,36	0,600	0,528	2,00E-03	2,00E-03

Tabela F.3- Resultados da Validação dos Códigos pelo benchmark-ASHRAE RP 1271-Caso 3 – plano longitudinal ($y = 1,22$ m)

$x = 0,22$ m											
Velocidade adimensional						TKE adimensional				Viscos. Turb.[Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,03	0,14	0,11	0,14	0,16	0,13	0,142	0,049	0,084	0,036	6,01E-04	3,21E-04
0,09	0,12	0,11	0,12	0,16	0,13	0,161	0,066	0,117	0,045	1,65E-03	5,71E-04
0,16	0,13	0,12	0,11	0,16	0,13	0,171	0,085	0,111	0,051	1,94E-03	6,47E-04
0,22	0,13	0,11	0,11	0,14	0,13	0,173	0,098	0,110	0,055	1,85E-03	6,80E-04
0,28	0,14	0,08	0,11	0,13	0,13	0,161	0,102	0,109	0,057	1,31E-03	7,40E-04
0,34	0,14	0,07	0,11	0,12	0,13	0,156	0,098	0,106	0,056	1,16E-03	8,18E-04
0,41	0,12	0,05	0,11	0,11	0,13	0,148	0,088	0,105	0,054	8,00E-04	8,63E-04
0,47	0,12	0,05	0,11	0,11	0,13	0,125	0,078	0,102	0,053	9,19E-04	8,93E-04
0,53	0,11	0,06	0,10	0,12	0,12	0,108	0,067	0,085	0,051	1,03E-03	9,28E-04
0,59	0,11	0,06	0,09	0,11	0,12	0,092	0,052	0,065	0,049	1,07E-03	9,81E-04
0,66	0,10	0,03	0,05	0,09	0,11	0,096	0,038	0,065	0,048	5,92E-04	1,02E-03
0,72	0,09	0,02	0,02	0,05	0,11	0,083	0,040	0,091	0,045	2,63E-04	1,06E-03
0,78	0,08	0,02	0,00	0,02	0,10	0,079	0,039	0,096	0,042	4,11E-04	1,08E-03
0,84	0,07	0,06	0,01	0,04	0,09	0,068	0,035	0,092	0,038	1,03E-03	1,07E-03
0,91	0,06	0,10	0,03	0,05	0,08	0,050	0,031	0,088	0,032	1,58E-03	1,00E-03
0,97	0,07	0,04	0,09	0,06	0,11	0,096	0,479	0,055	0,251	2,76E-04	3,54E-03
$x = 0,69$ m											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,05	0,06	0,08	0,14	0,02	0,045	0,088	0,096	0,037	2,64E-03	3,41E-04
0,59	0,12	0,08	0,08	0,13	0,12	0,122	0,076	0,085	0,058	3,82E-03	9,70E-04
0,66	0,10	0,06	0,05	0,10	0,11	0,105	0,061	0,084	0,048	3,00E-03	1,38E-03
0,72	0,09	0,03	0,04	0,08	0,10	0,091	0,047	0,118	0,047	1,21E-03	1,48E-03
0,78	0,08	0,05	0,03	0,04	0,09	0,075	0,038	0,107	0,047	1,90E-03	1,51E-03
0,84	0,08	0,08	0,02	0,09	0,08	0,065	0,046	0,096	0,043	2,12E-03	1,49E-03
0,91	0,08	0,09	0,02	0,02	0,07	0,062	0,092	0,106	0,035	1,43E-03	1,28E-03
0,97	0,28	0,28	0,30	0,17	0,24	0,698	0,752	0,638	0,519	1,56E-03	9,99E-04
$x = 1,14$ m											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,05	0,01	0,07	0,10	0,02	0,036	0,054	0,081	0,020	4,42E-03	9,26E-04
0,59	0,05	0,01	0,08	0,07	0,03	0,044	0,048	0,097	0,029	4,03E-03	1,28E-03
0,66	0,06	0,03	0,07	0,06	0,04	0,059	0,040	0,111	0,040	1,37E-03	1,32E-03
0,72	0,07	0,05	0,06	0,07	0,08	0,060	0,038	0,118	0,044	8,65E-04	1,51E-03
0,78	0,07	0,07	0,04	0,07	0,09	0,063	0,039	0,118	0,040	1,09E-03	1,61E-03
0,84	0,06	0,08	0,03	0,07	0,08	0,059	0,049	0,132	0,038	1,25E-03	1,78E-03
0,91	0,10	0,11	0,08	0,07	0,07	0,195	0,219	0,184	0,041	7,49E-04	8,72E-04

0,97	0,36	0,36	0,36	0,31	0,31	0,656	0,527	0,851	0,537	1,72E-03	1,89E-03
$x = 1,60 \text{ m}$											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,05	0,03	0,06	0,08	0,02	0,037	0,034	0,060	0,017	1,81E-03	1,02E-03
0,59	0,05	0,06	0,05	0,04	0,03	0,038	0,037	0,067	0,021	3,39E-03	1,61E-03
0,66	0,06	0,08	0,04	0,04	0,03	0,059	0,045	0,086	0,026	4,45E-03	1,72E-03
0,72	0,06	0,07	0,04	0,06	0,04	0,046	0,053	0,102	0,030	3,53E-03	1,90E-03
0,78	0,06	0,07	0,04	0,05	0,05	0,042	0,072	0,114	0,034	2,55E-03	2,03E-03
0,84	0,06	0,09	0,05	0,04	0,07	0,046	0,138	0,169	0,033	2,38E-03	1,62E-03
0,91	0,16	0,17	0,15	0,07	0,09	0,479	0,283	0,436	0,112	2,76E-03	1,14E-03
0,97	0,33	0,33	0,37	0,34	0,31	0,493	0,339	0,563	0,388	1,81E-03	2,20E-03
$x = 2,05 \text{ m}$											
	Velocidade adimensional					TKE adimensional				Viscos. Turb.[Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,03	0,13	0,14	0,19	0,16	0,10	0,229	0,278	0,255	0,200	7,32E-04	2,26E-03
0,09	0,12	0,18	0,08	0,08	0,16	0,234	0,325	0,304	0,153	2,98E-03	2,64E-03
0,16	0,13	0,22	0,05	0,06	0,20	0,295	0,423	0,375	0,144	5,71E-03	2,46E-03
0,22	0,13	0,22	0,04	0,06	0,22	0,339	0,517	0,407	0,138	5,91E-03	2,28E-03
0,28	0,13	0,21	0,04	0,07	0,24	0,299	0,517	0,419	0,133	5,48E-03	2,08E-03
0,34	0,14	0,19	0,04	0,06	0,26	0,378	0,512	0,423	0,134	5,09E-03	1,91E-03
0,41	0,14	0,18	0,04	0,06	0,27	0,361	0,475	0,418	0,146	4,89E-03	1,83E-03
0,47	0,14	0,17	0,04	0,06	0,25	0,390	0,411	0,399	0,168	4,42E-03	1,79E-03
0,53	0,12	0,13	0,05	0,06	0,20	0,245	0,329	0,367	0,184	3,38E-03	1,80E-03
0,59	0,12	0,08	0,06	0,07	0,16	0,261	0,258	0,327	0,174	2,24E-03	1,85E-03
0,66	0,11	0,05	0,05	0,08	0,13	0,264	0,216	0,284	0,160	1,27E-03	1,99E-03
0,72	0,09	0,04	0,02	0,08	0,11	0,238	0,190	0,241	0,143	1,14E-03	2,02E-03
0,78	0,08	0,09	0,03	0,09	0,09	0,129	0,161	0,205	0,125	2,56E-03	1,98E-03
0,84	0,11	0,14	0,09	0,08	0,09	0,294	0,192	0,200	0,135	3,83E-03	2,00E-03
0,91	0,21	0,25	0,19	0,12	0,14	0,540	0,270	0,367	0,218	3,99E-03	2,44E-03
0,97	0,30	0,33	0,33	0,30	0,25	0,469	0,209	0,394	0,238	1,76E-03	1,83E-03

Tabela F.4- Resultados da Validação dos Códigos pelo benchmark-ASHRAE RP 1271-Caso 3 – plano transversal ($x = 1,22$ m)

$y = 0,22$ m											
Velocidade adimensional						TKE adimensional				Viscos. Turb.[Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,03	0,23	0,26	0,16	0,21	0,18	0,244	0,159	0,194	0,090	1,42E-03	1,58E-03
0,09	0,17	0,19	0,10	0,17	0,13	0,353	0,162	0,252	0,104	2,95E-03	2,36E-03
0,16	0,12	0,08	0,06	0,13	0,11	0,230	0,127	0,244	0,122	1,20E-03	2,76E-03
0,22	0,09	0,06	0,06	0,09	0,09	0,151	0,096	0,206	0,122	9,27E-04	2,94E-03
0,28	0,05	0,07	0,03	0,06	0,06	0,094	0,066	0,165	0,108	1,05E-03	3,00E-03
0,34	0,04	0,05	0,04	0,05	0,04	0,049	0,046	0,129	0,089	7,98E-04	2,95E-03
0,41	0,04	0,04	0,04	0,04	0,03	0,034	0,043	0,099	0,073	6,36E-04	2,64E-03
0,47	0,04	0,04	0,04	0,03	0,03	0,036	0,035	0,074	0,065	6,43E-04	2,23E-03
0,53	0,04	0,02	0,04	0,03	0,04	0,025	0,024	0,052	0,055	3,83E-04	1,87E-03
0,59	0,04	0,02	0,05	0,03	0,03	0,031	0,024	0,043	0,045	2,99E-04	1,75E-03
0,66	0,04	0,04	0,04	0,03	0,02	0,022	0,030	0,047	0,043	5,94E-04	1,72E-03
0,72	0,03	0,02	0,03	0,03	0,05	0,019	0,038	0,054	0,042	3,56E-04	1,64E-03
0,78	0,04	0,03	0,02	0,04	0,06	0,026	0,046	0,059	0,036	4,77E-04	1,73E-03
0,84	0,04	0,07	0,01	0,04	0,06	0,029	0,056	0,068	0,033	1,16E-03	1,74E-03
0,91	0,07	0,15	0,03	0,05	0,06	0,117	0,111	0,092	0,036	2,30E-03	7,56E-04
0,97	0,36	0,40	0,31	0,32	0,33	0,949	0,532	0,550	0,498	2,18E-03	1,77E-03
$y = 0,69$ m											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,06	0,04	0,06	0,08	0,01	0,060	0,061	0,078	0,147	2,10E-03	3,88E-04
0,59	0,07	0,08	0,05	0,10	0,03	0,081	0,050	0,080	0,027	4,07E-03	8,65E-04
0,66	0,05	0,09	0,03	0,06	0,03	0,043	0,042	0,065	0,031	4,46E-03	1,44E-03
0,72	0,05	0,09	0,02	0,04	0,03	0,043	0,049	0,060	0,032	4,48E-03	1,89E-03
0,78	0,07	0,09	0,01	0,02	0,03	0,048	0,057	0,062	0,030	3,41E-03	2,01E-03
0,84	0,06	0,09	0,02	0,03	0,02	0,045	0,061	0,070	0,027	2,31E-03	1,42E-03
0,91	0,09	0,07	0,04	0,09	0,05	0,159	0,110	0,153	0,145	1,21E-03	1,19E-03
0,97	0,36	0,28	0,34	0,31	0,37	0,821	0,543	0,681	0,544	1,52E-03	2,10E-03
$y = 1,14$ m											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,05	0,05	0,08	0,10	0,02	0,032	0,049	0,072	0,017	4,24E-03	8,82E-04
0,59	0,06	0,05	0,08	0,08	0,02	0,048	0,051	0,091	0,026	3,63E-03	1,36E-03
0,66	0,06	0,02	0,07	0,08	0,03	0,046	0,047	0,107	0,036	1,11E-03	1,51E-03
0,72	0,06	0,03	0,06	0,11	0,06	0,047	0,044	0,100	0,042	1,30E-03	1,68E-03
0,78	0,07	0,04	0,05	0,10	0,08	0,061	0,042	0,099	0,041	1,32E-03	1,74E-03
0,84	0,06	0,03	0,04	0,08	0,08	0,053	0,053	0,131	0,039	7,18E-04	1,83E-03
0,91	0,07	0,10	0,11	0,05	0,06	0,070	0,228	0,266	0,072	1,58E-03	7,96E-04

0,97	0,33	0,36	0,38	0,33	0,34	0,850	0,478	0,776	0,540	1,96E-03	2,06E-03
y = 1,60 m											
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,53	0,06	0,05	0,07	0,09	0,02	0,047	0,043	0,096	0,020	2,75E-03	7,64E-04
0,59	0,07	0,06	0,06	0,07	0,02	0,057	0,047	0,145	0,032	3,72E-03	1,40E-03
0,66	0,06	0,09	0,05	0,07	0,03	0,053	0,056	0,170	0,040	5,34E-03	2,00E-03
0,72	0,07	0,10	0,04	0,09	0,03	0,067	0,055	0,175	0,037	4,92E-03	1,95E-03
0,78	0,07	0,10	0,05	0,10	0,03	0,056	0,053	0,168	0,033	3,66E-03	1,81E-03
0,84	0,07	0,08	0,05	0,10	0,04	0,054	0,052	0,150	0,032	2,15E-03	1,32E-03
0,91	0,13	0,06	0,05	0,07	0,11	0,320	0,111	0,149	0,181	9,10E-04	1,35E-03
0,97	0,44	0,31	0,32	0,27	0,41	0,883	0,577	0,861	0,494	1,65E-03	2,03E-03
y = 2,05 m											
	Velocidade adimensional					TKE adimensional				Viscos. Turb.[Pa.s]	
z/h	Exp.	Contam	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Exp.	CFX-sst kw	CFX-RNG ke	Fluent	Contam	Fluent
0,03	0,25	0,29	0,30	0,22	0,18	0,242	0,098	0,185	0,085	1,59E-03	1,42E-03
0,09	0,19	0,27	0,25	0,15	0,15	0,232	0,159	0,208	0,111	4,27E-03	2,15E-03
0,16	0,13	0,19	0,10	0,11	0,14	0,173	0,167	0,198	0,135	5,05E-03	2,67E-03
0,22	0,09	0,13	0,04	0,08	0,12	0,148	0,085	0,178	0,144	3,46E-03	3,13E-03
0,28	0,07	0,08	0,03	0,06	0,09	0,093	0,071	0,145	0,136	2,15E-03	3,41E-03
0,34	0,05	0,04	0,03	0,05	0,07	0,068	0,070	0,117	0,120	9,75E-04	3,51E-03
0,41	0,04	0,05	0,03	0,04	0,06	0,030	0,071	0,105	0,100	1,22E-03	3,38E-03
0,47	0,04	0,06	0,02	0,03	0,05	0,024	0,071	0,058	0,082	1,68E-03	3,02E-03
0,53	0,04	0,07	0,02	0,03	0,05	0,024	0,074	0,095	0,067	1,79E-03	2,70E-03
0,59	0,04	0,05	0,04	0,04	0,04	0,025	0,077	0,085	0,056	1,30E-03	2,50E-03
0,66	0,04	0,04	0,06	0,05	0,03	0,021	0,073	0,078	0,048	9,58E-04	2,45E-03
0,72	0,04	0,03	0,06	0,05	0,02	0,024	0,067	0,078	0,040	9,27E-04	2,22E-03
0,78	0,05	0,04	0,06	0,04	0,04	0,035	0,061	0,090	0,035	1,05E-03	2,06E-03
0,84	0,05	0,06	0,06	0,04	0,03	0,034	0,057	0,117	0,030	1,66E-03	1,70E-03
0,91	0,10	0,10	0,05	0,10	0,05	0,204	0,152	0,223	0,061	1,62E-03	6,40E-04
0,97	0,35	0,35	0,32	0,34	0,38	0,821	0,059	0,747	0,501	1,89E-03	1,78E-03

ANEXO G

**Tabela G.1- Resultados da Validação dos Códigos pelo benchmark-laboratório YIN *et al* (2009)-
Caso 5 –velocidades**

P1						P3				
Velocidade [$m.s^{-1}$]						Velocidade [$m.s^{-1}$]				
z [m]	Exp.	Contam	CFX- sst kw	CFX- RNG ke	Fluent	Exp.	Contam	CFX- sst kw	CFX- RNG ke	Fluent
0,12	0,08	0,08	0,05	0,09	0,06	0,02	0,01	0,02	0,02	0,02
0,35	0,04	0,02	0,02	0,01	0,02	0,01	0,01	0,01	0,02	0,01
0,85	0,02	0,01	0,02	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	0,01	0,01
1,35	0,03	0,02	0,01	0,01	0,01	0,03	0,03	0,01	0,01	0,01
1,85	0,03	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,03	0,01	0,01	0,01
2,35	0,03	0,03	0,00	0,01	0,01	0,02	0,02	0,01	0,01	0,02
2,60	0,03	0,06	0,02	0,01	0,01	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
P5						P7				
Velocidade [$m.s^{-1}$]						Velocidade [$m.s^{-1}$]				
z [m]	Exp.	Contam	CFX- sst kw	CFX- RNG ke	Fluent	Exp.	Contam	CFX- sst kw	CFX- RNG ke	Fluent
0,12	0,06	0,12	0,07	0,06	0,06	0,05	0,02	0,05	0,03	0,04
0,35	0,06	0,04	0,02	0,01	0,02	0,03	0,02	0,05	0,03	0,04
0,85	0,02	0,03	0,01	0,01	0,01	0,04	0,03	0,03	0,02	0,03
1,35	0,02	0,01	0,00	0,01	0,01	0,02	0,02	0,01	0,02	0,01
1,85	0,03	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,03	0,00	0,00	0,00
2,35	0,04	0,02	0,01	0,02	0,02	0,04	0,01	0,01	0,01	0,02
2,60	0,03	0,03	0,03	0,02	0,02	0,04	0,03	0,01	0,01	0,01
P8										
Velocidade [$m.s^{-1}$]										
z [m]	Exp.	Contam	CFX- sst kw	CFX- RNG ke	Fluent					
0,12	0,08	0,03	0,07	0,06	0,07					
0,35	0,03	0,03	0,03	0,04	0,04					
0,85	0,02	0,02	0,00	0,00	0,01					
1,35	0,04	0,03	0,01	0,02	0,02					
1,85	0,02	0,02	0,01	0,02	0,01					
2,35	0,05	0,02	0,02	0,02	0,01					
2,60	0,02	0,05	0,05	0,06	0,04					

ANEXO H

Dados das Medições Experimentais na Cabine de Segurança Biológica (BSC) Modelada nas Simulações.

Tabela H.1- “Dados das Medições da Velocidade Média no Plano z= 370mm da Área de Trabalho da BSC”

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
1	1 ^a	0,44
	2 ^a	0,45
	3 ^a	0,44
	média	0,44
	σ	0,01
2	1 ^a	0,46
	2 ^a	0,46
	3 ^a	0,42
	média	0,45
	σ	0,02
3	1 ^a	0,31
	2 ^a	0,30
	3 ^a	0,27
	média	0,29
	σ	0,02
4	1 ^a	0,34
	2 ^a	0,32
	3 ^a	0,36
	média	0,34
	σ	0,02
5	1 ^a	0,27
	2 ^a	0,26
	3 ^a	0,29
	média	0,27
	σ	0,02
6	1 ^a	0,27
	2 ^a	0,29
	3 ^a	0,31
	média	0,29
	σ	0,02

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
7	1 ^a	0,29
	2 ^a	0,33
	3 ^a	0,31
	média	0,31
	σ	0,02
8	1 ^a	0,39
	2 ^a	0,42
	3 ^a	0,42
	média	0,41
	σ	0,02

	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
9	1 ^a	0,44
	2 ^a	0,46
	3 ^a	0,43
	média	0,44
	σ	0,02
10	1 ^a	0,38
	2 ^a	0,37
	3 ^a	0,40
	média	0,38
	σ	0,02
11	1 ^a	0,33
	2 ^a	0,34
	3 ^a	0,30
	média	0,32
	σ	0,02
12	1 ^a	0,35
	2 ^a	0,33
	3 ^a	0,35
	média	0,34
	σ	0,01
13	1 ^a	0,32
	2 ^a	0,30
	3 ^a	0,30
	média	0,31

	σ	0,01
14	1 ^a	0,36
	2 ^a	0,36
	3 ^a	0,35
	média	0,36
	σ	0,01
15	1 ^a	0,30
	2 ^a	0,30
	3 ^a	0,30
	média	0,30
	σ	0,00
16	1 ^a	0,41
	2 ^a	0,41
	3 ^a	0,43
	média	0,42
	σ	0,01

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
17	1 ^a	0,56
	2 ^a	0,56
	3 ^a	0,56
	média	0,56
	σ	0,00
18	1 ^a	0,50
	2 ^a	0,48
	3 ^a	0,47
	média	0,48
	σ	0,02
19	1 ^a	0,48
	2 ^a	0,45
	3 ^a	0,49
	média	0,47
	σ	0,02
20	1 ^a	0,36
	2 ^a	0,36
	3 ^a	0,37
	média	0,36
	σ	0,01

21	1 ^a	0,45
	2 ^a	0,47
	3 ^a	0,47
	média	0,46
	σ	0,01
22	1 ^a	0,36
	2 ^a	0,35
	3 ^a	0,32
	média	0,34
	σ	0,02
23	1 ^a	0,32
	2 ^a	0,32
	3 ^a	0,29
	média	0,31
	σ	0,02
24	1 ^a	0,45
	2 ^a	0,45
	3 ^a	0,42
	média	0,44
	σ	0,02

Tabela H.2- “Dados das Medições da Velocidade Média no Plano z= 100mm da Área de Trabalho da BSC”

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
1	1 ^a	0,27
	2 ^a	0,27
	3 ^a	0,27
	média	0,27
	σ	0,00
2	1 ^a	0,21
	2 ^a	0,24
	3 ^a	0,22
	média	0,22
	σ	0,02
3	1 ^a	0,17
	2 ^a	0,14
	3 ^a	0,17
	média	0,16

	σ	0,02
4	1 ^a	0,15
	2 ^a	0,15
	3 ^a	0,14
	média	0,15
	σ	0,01
5	1 ^a	0,14
	2 ^a	0,15
	3 ^a	0,11
	média	0,13
	σ	0,02
6	1 ^a	0,21
	2 ^a	0,20
	3 ^a	0,20
	média	0,20
	σ	0,01
7	1 ^a	0,12
	2 ^a	0,12
	3 ^a	0,12
	média	0,12
	σ	0,00
8	1 ^a	0,20
	2 ^a	0,19
	3 ^a	0,19
	média	0,19
	σ	0,01

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
9	1 ^a	0,31
	2 ^a	0,31
	3 ^a	0,29
	média	0,30
	σ	0,01
10	1 ^a	0,22
	2 ^a	0,23
	3 ^a	0,23
	média	0,23
	σ	0,01

11	1 ^a	0,25
	2 ^a	0,26
	3 ^a	0,26
	média	0,26
	σ	0,01
12	1 ^a	0,15
	2 ^a	0,15
	3 ^a	0,15
	média	0,15
	σ	0,00
13	1 ^a	0,20
	2 ^a	0,19
	3 ^a	0,18
	média	0,19
	σ	0,01
14	1 ^a	0,21
	2 ^a	0,21
	3 ^a	0,21
	média	0,21
	σ	0,00
15	1 ^a	0,18
	2 ^a	0,18
	3 ^a	0,18
	média	0,18
	σ	0,00
16	1 ^a	0,26
	2 ^a	0,26
	3 ^a	0,26
	média	0,26
	σ	0,00

<i>i</i>	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
17	1 ^a	0,43
	2 ^a	0,43
	3 ^a	0,42
	média	0,43
	σ	0,01
18	1 ^a	0,41

	2 ^a	0,41
	3 ^a	0,41
	<i>média</i>	0,41
	σ	0,00
19	1 ^a	0,42
	2 ^a	0,42
	3 ^a	0,42
	<i>média</i>	0,42
	σ	0,00
20	1 ^a	0,40
	2 ^a	0,42
	3 ^a	0,41
	<i>média</i>	0,41
	σ	0,01
21	1 ^a	0,42
	2 ^a	0,42
	3 ^a	0,42
	<i>média</i>	0,42
	σ	0,00
22	1 ^a	0,41
	2 ^a	0,41
	3 ^a	0,40
	<i>média</i>	0,41
	σ	0,01
23	1 ^a	0,38
	2 ^a	0,39
	3 ^a	0,38
	<i>média</i>	0,38
	σ	0,01
24	1 ^a	0,42
	2 ^a	0,43
	3 ^a	0,44
	<i>média</i>	0,43
	σ	0,01

Tabela H.3- “Dados das Medições da Velocidade Média nas Grelhas de Exaustão da Área de Trabalho da BSC”

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
1	1 ^a	6,23
	2 ^a	5,68
	3 ^a	5,62
	média	5,84
	σ	0,34
2	1 ^a	6,30
	2 ^a	6,29
	3 ^a	5,93
	média	6,17
	σ	0,21
3	1 ^a	6,76
	2 ^a	6,32
	3 ^a	7,03
	média	6,70
	σ	0,36
4	1 ^a	5,91
	2 ^a	6,62
	3 ^a	6,57
	média	6,37
	σ	0,40
5	1 ^a	6,16
	2 ^a	6,80
	3 ^a	6,26
	média	6,41
	σ	0,34
6	1 ^a	6,17
	2 ^a	7,41
	3 ^a	6,82
	média	6,80
	σ	0,62
7	1 ^a	6,87
	2 ^a	7,14
	3 ^a	7,30
	média	7,10
	σ	0,22

8	1 ^a	6,81
	2 ^a	6,08
	3 ^a	6,55
	média	6,48
	σ	0,37

i	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
9	1 ^a	7,91
	2 ^a	8,11
	3 ^a	8,55
	média	8,19
	σ	0,33
10	1 ^a	7,23
	2 ^a	8,00
	3 ^a	8,27
	média	7,83
	σ	0,54
11	1 ^a	8,61
	2 ^a	9,15
	3 ^a	7,69
	média	8,48
	σ	0,74
12	1 ^a	9,69
	2 ^a	8,47
	3 ^a	8,61
	média	8,92
	σ	0,67
13	1 ^a	9,40
	2 ^a	9,12
	3 ^a	8,23
	média	8,92
	σ	0,61
14	1 ^a	9,43
	2 ^a	8,71
	3 ^a	7,66
	média	8,60
	σ	0,89
15	1 ^a	8,50

	2 ^a	8,05
	3 ^a	8,72
	média	8,42
	σ	0,34
16	1 ^a	7,64
	2 ^a	8,10
	3 ^a	7,82
	média	7,85
	σ	0,23

<i>i</i>	\bar{U}_i [m. s ⁻¹]	
17	1 ^a	6,63
	2 ^a	8,05
	3 ^a	8,20
	média	7,63
	σ	0,87
18	1 ^a	6,94
	2 ^a	5,96
	3 ^a	7,11
	média	6,67
	σ	0,62
19	1 ^a	6,99
	2 ^a	6,25
	3 ^a	7,00
	média	6,75
	σ	0,43
20	1 ^a	6,62
	2 ^a	7,64
	3 ^a	7,52
	média	7,26
	σ	0,56
21	1 ^a	6,27
	2 ^a	6,93
	3 ^a	7,14
	média	6,78
	σ	0,45
22	1 ^a	6,55
	2 ^a	6,51

	3 ^a	6,48
	<i>média</i>	6,51
	σ	0,04
23	1 ^a	7,09
	2 ^a	8,16
	3 ^a	7,94
	<i>média</i>	7,73
	σ	0,57
24	1 ^a	7,30
	2 ^a	8,33
	3 ^a	8,44
	<i>média</i>	8,02
	σ	0,63